

Πρόχειρες Σημειώσεις Υπολογιστικής Φυσικής II

Για το μάθημα Υπολογιστικής Φυσικής II
9ο εξάμηνο Σχολής ΕΜΦΕ
Εθνικό Μετσόβιο Πολυτεχνείο
Επικ. Καθηγητής Κωνσταντίνος Ν. Αναγνωστόπουλος

18 Οκτωβρίου 2005

Οι παρούσες σημειώσεις είναι προς το παρόν αυτό που λέει και ο τίτλος: ΠΡΟΧΕΙΡΕΣ! Ο συγγραφέας θα εκτιμήσει ιδιαίτερος οχόλια–διορθώσεις που μπορούν να σταλούν ηλεκτρονικά στη διεύθυνση konstant@mail.ntua.gr. Επίσης ο αναγνώστης θα πρέπει να συμβουλευέται στο στάδιο αυτό και την ιστοσελίδα του μαθήματος www.physics.ntua.gr/rh47/. Εκεί για την ώρα υπάρχει η βιβλιογραφία και σχετικές ασκήσεις καθώς και οι κώδικες που αναφέρονται στο κείμενο.

Είναι προϊόν της διδασκαλίας του μαθήματος υπολογιστικής φυσικής σε φοιτητές της Σχολής Εφαρμοσμένων Μαθηματικών και Φυσικών Επιστημών στο μάθημα της Υπολογιστικής Φυσικής II που διδάσκεται στο 9ο εξάμηνο της Σχολής. Αποτελεί μια πολύ βασική και πρακτική εισαγωγή σε μεθόδους Μόντε Κάρλο στην φυσική, και ειδικότερα σε πρότυπα της στατιστικής φυσικής. Παρ’ όλο που η διεθνής βιβλιογραφία παρέχει καλά συγγράμματα όπως αυτό των Newman και Barkema και του B. Berg η ελληνική βιβλιογραφία δεν καλύπτει επαρκώς τα θέματα που θέλαμε να καλύψουμε στο συγκεκριμένο μάθημα. Ο ανήσυχος και καλός φοιτητής θα πρέπει να ανατρέξει στα παραπάνω συγγράμματα και στη βιβλιογραφία που παρατίθεται ώστε να εμβαθύνει τις γνώσεις του.

Οι μέθοδοι Μόντε Κάρλο εφαρμόζονται σε εξαιρετικά πλατύ φάσμα της επιστήμης όπως ενδεικτικά στη φυσική συμπυκνωμένης ύλης και των υλικών, τη φυσική υψηλών ενεργειών (θεωρητική και πειραματική), τη χημεία και τη βιολογία όπως και σε οικονομικά προβλήματα με έμφαση τον κλάδο της “econophysics”

Σε πρακτικό επίπεδο, γίνεται προσπάθεια μέσα στις περιορισμένες δυνατότητες του μαθήματος να πάρει μια γεύση ο αναγνώστης από όλες τις βασικές φάσεις ενός προγράμματος προσομοίωσης ενός φυσικού προτύπου με τη μέθοδο Μόντε Κάρλο, από τη φάση σχεδιασμού με τη χρήση κατάλληλων αλγορίθμων, συγγραφή και διόρθωση του κώδικα, συλλογή και τέλος ανάλυση των δεδομένων για τη διεξαγωγή χρήσιμων φυσικών αποτελεσμάτων. Μελετάται κυρίως το διδιάστατο πρότυπο Ising το οποίο αποτελεί το βασικό πρότυπο–παιχνίδι όπου δοκιμάζονται καινούργιες ιδέες στη στατιστική φυσική και θεωρία πεδίου λόγω της απλότητάς του αλλά και των μη τετριμμένων ιδιοτήτων του. Συνεχείς μεταβάσεις φάσεων, ομάδα επανακανονικοποίησης

ΠΕΡΙΕΧΟΜΕΝΑ

1	ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ	1
1.1	ΕΙΣΑΓΩΓΗ	1
1.2	ΕΝΤΡΟΠΙΑ	4
1.3	ΔΙΑΚΥΜΑΝΣΕΙΣ	8
1.4	ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΣΥΣΧΕΤΙΣΜΟΥ	11
1.5	ΠΡΟΤΥΠΟ ISING	13
1.6	ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ	19

ΒΙΒΛΙΟΓΡΑΦΙΑ

[Κεφάλαιο 1]

- [1] M. E. J. Newman and G. T. Barkema, *Monte Carlo Methods in Statistical Physics*, Clarendon Press, Oxford. Εξαιρετο βιβλίο που θα μπορούσε να είναι το κύριο βιβλίο για το μάθημα. Ας όψεται ο νόμος που απαγορεύει τη διανομή βιβλίων στους φοιτητές γραμμένα στην Αγγλική. Η εισαγωγή στην στατιστική φυσική συνοψίζει τις βασικές ιδέες που θα χρειαστούμε.
- [2] L. Kadanoff, *Statistical Physics – Statics, Dynamics and Renormalization*, World Scientific. Εξαιρετο βιβλίο στατιστικής φυσικής από τον απόλυτα ειδικό στο πεδίο.
- [3] J. J. Binney, N. J. Dowrick, A. J. Fisher and M. E. J. Newman, *The Theory of Critical Phenomena*, Oxford. Πολύ ωραία και παιδαγωγική εισαγωγή στην θεωρία των κρίσιμων φαινομένων και της ομάδας επανακανονικοποίησης.
- [4] R. K. Pathria, *Statistical Mechanics*, Pergamon. Κλασικό για μεταπτυχιακό επίπεδο μάθημα στατιστικής φυσικής.
- [5] F. Mandl, *Στατιστική Φυσική*, Γ. Α. Πνευματικού. Απλή εισαγωγή σε προπτυχιακό επίπεδο.
- [6] R. J. Baxter, *Exactly Solved Models in Statistical Mechanics*. Ανάλυση των (λίγων) προτύπων στατιστικής φυσικής που επιδέχονται ακριβούς αναλυτικής λύσης.
- [7] E. Ising, *Beitrag zur Theorie des Ferromagnetismus*, *Z. Phys.* **31** (1925) 253–258. Το πρότυπο Ising στην πρώτη του διατύπωση με τη λύση του μονοδιάστατου προβλήματος.

- [8] L. Onsager, *Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition*, *Phys. Rev.* **65** (1944) 117–119. Η αναλυτική λύση του διδιάστατου πρότυπου Ising, η λύση Onsager.
- [9] K. Huang, *Statistical Mechanics*, John Wiley & Sons, New York, ed. 1987. Λεπτομερής ανάλυση της λύσης Onsager.

1

ΣΤΑΤΙΣΤΙΚΗ ΦΥΣΙΚΗ

Στο κεφάλαιο αυτό γίνεται μια επισκόπηση βασικών εννοιών της στατιστικής φυσικής. Στόχος είναι οι έννοιες αυτές να “φρεσκαριστούν” σε σύντομο χώρο στο κείμενο, οπότε δεν γίνεται προσπάθεια να είμαστε απόλυτα ακριβείς. Αν κάτι δεν είναι κατανοητό στο διάβασμα του κεφαλαίου, πρέπει ο φοιτητής να ανατρέξει στη βιβλιογραφία στατιστικής φυσικής. Ενδεικτικά, καλά βιβλία για το επιθυμητό επίπεδο γνώσεων αναφέρονται στην βιβλιογραφία των σημειώσεων [1]–[5].

1.1 ΕΙΣΑΓΩΓΗ

Η Στατιστική Φυσική έχει σαν σκοπό να περιγράψει συστήματα με πολύ μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας N . Απλά συστήματα έχουν τυπικά $N \approx 10^{23} - 10^{44}$. Για τα συστήματα αυτά οι εξισώσεις που περιγράφουν μικροσκοπικά το σύστημα είναι πρακτικά αδύνατον και τελικά μάλλον άχρηστο να λυθούν. Αρκούν μερικά σωστά ορισμένες “χονδροειδείς ιδιότητες” (bulk properties) του συστήματος για να μας δώσουν τις χρήσιμες φυσικές πληροφορίες για το σύστημα. Λ.χ. σε έναν μαγνήτη πολλές φορές μας αρκεί να γνωρίζουμε την εσωτερική ενέργεια και μαγνήτιση του υλικού, σε ένα ρευστό την ενέργεια και πυκνότητά του κ.ο.κ. και όχι αναλυτικά την θέση, ενέργεια, ορμή και στροφορμή κάθε σωματιδίου που τα αποτελούν. Αυτά είναι γνωστά από τη θερμοδυναμική, στη στατιστική φυσική όμως γίνεται η απόπειρα να παραχθούν οι παραπάνω ιδιότητες των συστημάτων από τις μικροσκοπικές τους ιδιότητες, δηλ. κινηματική – βαθμοί ελευθερίας και τη δυναμική – Hamiltonian του συστήματος.

Στην περίπτωση μας θα κάνουμε τις, όχι ιδιαίτερα περιοριστικές, υποθέσεις ότι το σύστημά μας περιγράφεται από διακριτές καταστάσεις που μπορούν να

απαριθμηθούν μέσα σε ένα σύνολο $\{\mu\}$ με αντίστοιχες ενέργειες $E_0 < E_1 < \dots < E_\mu < \dots$. Το σύστημα αυτό είναι σε επαφή με μεγάλη δεξαμενή θερμότητας θερμοκρασίας $\beta = 1/kT$ με το οποίο μπορεί να αλληλεπιδρά. Η επαφή με τη δεξαμενή έχει σαν αποτέλεσμα να υπάρχουν *τυχαίες* μεταβάσεις του συστήματος με τρόπο που προσδιορίζεται από τη δυναμική του συστήματος. Η θεμελιώδεις ποσότητες που μας ενδιαφέρουν είναι τα βάρη (weights) $w_\mu(t)$ που μας δίνουν την πιθανότητα να είναι το σύστημα στην κατάσταση μ τη χρονική στιγμή t . Αυτές κωδικοποιούν την μικροσκοπική φυσική στη στατιστική φυσική.

Εστω ότι $R(\mu \rightarrow \nu)$ δίνουν το ρυθμό μετάβασης από την κατάσταση $\mu \rightarrow \nu$, δηλ.

$$R(\mu \rightarrow \nu)dt = \text{Πιθανότητα μετάβασης } \mu \rightarrow \nu \text{ στο χρόνο } dt \quad (1.1)$$

Τότε μπορούμε να γράψουμε την πολύ γενική “δεοπόζουσα εξίσωση” (Master Equation):

$$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = \sum_\nu \{w_\nu(t)R(\nu \rightarrow \mu) - w_\mu(t)R(\mu \rightarrow \nu)\} \quad (1.2)$$

$$\sum_\mu w_\mu(t) = 1. \quad (1.3)$$

Η πρώτη από τις παραπάνω εξισώσεις μας λέει απλά ότι η μεταβολή του βάρους $w_\mu(t)$ είναι ίση με το ρυθμό που το σύστημα εισέρχεται στην κατάσταση μ από οποιαδήποτε άλλη ν μείον το ρυθμό με τον οποίο φεύγει από την κατάσταση μ . Η δεύτερη εκφράζει ότι τα βάρη $w_\mu(t)$ ερμηνεύονται ως πιθανότητα και φυσικά η πιθανότητα να είναι το σύστημα σε κάποια κατάσταση είναι ίση με 1.

Οι ρυθμοί μετάβασης $R(\mu \rightarrow \nu)$ προκύπτουν από τη θερμική φύση της αλληλεπίδρασης του συστήματος με τη θερμική δεξαμενή. Στην πράξη αυτοί προσομοιώνονται με κατάλληλες επιλογές κατά τη διάρκεια των υπολογισμών Μόντε Κάρλο. Τα $R(\mu \rightarrow \nu)$ θεωρούνται ανεξάρτητα του χρόνου οπότε το παραπάνω σύστημα εξισώσεων για τα $w_\mu(t)$ είναι γραμμικό, και ο περιορισμός $0 \leq w_\mu(t) \leq 1$ οδηγεί στο (μη τετριμμένο) συμπέρασμα ότι σε άπειρο χρόνο τα $w_\mu(t)$ συγκλίνουν γρήγορα (για μεγάλα συστήματα) σε αριθμούς p_μ , τις πιθανότητες κατάληψης ισορροπίας. Δηλαδή μετά από κάποιο χρόνο

$$\frac{dw_\mu(t)}{dt} = 0 \quad (1.4)$$

$$p_\mu = \lim_{t \rightarrow \infty} w_\mu(t) \quad \sum_\mu p_\mu = 1. \quad (1.5)$$

Οι πιθανότητες p_μ για σύστημα σε ισορροπία με θερμική ισορροπία με δεξαμενή θερμοκρασίας $\beta = 1/kT$, $k = 1.38 \times 10^{-23} JK^{-1}$ μπορεί να δειχθεί (Gibbs

β^{-1}	Χαρακτηριστική κλίμακα
1/40 eV	\approx Θερμ. Δωματίου/Βιολογία
1-10 eV	\approx Ατομική φυσική/Χημεία
1 MeV	\approx Πυρηνική Φυσική
512 MeV	$\approx m_e$
1 GeV	$\approx m_p$
0.1-1 TeV	$\approx m_{\text{Weak}}/\text{Φυσ. Υψηλών Ενέργειών (LHC)}$
10^{19} GeV	$\approx m_{\text{Planck}}/\text{Κβαντική Βαρύτητα}$

Πίνακας 1.1: Χαρακτηριστικές κλίμακες ενέργειας/θερμοκρασίας στη φύση

1902) ότι ακολουθούν την κατανομή Boltzman

$$p_\mu = \frac{1}{Z} e^{-\beta E_\mu}. \quad (1.6)$$

Η παράμετρος β θα αναφέρεται απλά ως η θερμοκρασία του συστήματος και βλέπουμε ότι μέσω του εκθετικού στην εξίσωση (1.6) καθορίζει μία χαρακτηριστική ενέργεια για το σύστημα (βλ. Πίνακα 1.1). Η μέτρησή της σε βαθμούς Kelvin κλπ οφείλεται στην αρχική άγνοια του ορισμού της στην θερμοδυναμική.

Η σταθερά Z στην (1.6) είναι η συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος και είναι η σταθερά κανονικοποίησης της κατανομής p_μ . Η σχέση $\sum_\mu p_\mu = 1$ μας δίνει

$$Z(\beta) = \sum_\mu e^{-\beta E_\mu} \quad (1.7)$$

Η τιμή μιας φυσικής ποσότητας που μετρείται στο εργαστήριο έχει στοχαστικό χαρακτήρα. Για συστήματα με πολύ μεγάλο αριθμό βαθμών ελευθερίας N πρακτικά κανείς ενδιαφέρεται για τη μέση τιμή μιας ποσότητας μια και η πιθανότητα να μετρήσει μια τιμή που να διαφέρει σημαντικά από αυτή είναι αμελητέα. Σύμφωνα με τα παραπάνω η μέση τιμή $\langle Q \rangle$ μιας φυσικής ποσότητας Q η οποία παίρνει την τιμή Q_μ στην κατάσταση μ θα είναι

$$\langle Q \rangle = \sum_\mu p_\mu Q_\mu = \frac{1}{Z} \sum_\mu Q_\mu e^{-\beta E_\mu}. \quad (1.8)$$

Όπως θα δούμε παρακάτω η τυπική απόκλιση ΔQ για ένα τυπικό θερμοδυναμικό σύστημα είναι τέτοια ώστε

$$\frac{\Delta Q}{Q} \sim \frac{1}{\sqrt{N}} \quad (1.9)$$

ποσοστό το οποίο είναι αμελητέο για συνήθη μακροσκοπικά συστήματα. (π.χ. για $N \sim 10^{23}$ έχουμε $\Delta Q/Q \sim 10^{-11}$). Για το λόγο αυτό όταν το σύστημα είναι μεγάλο οι διακυμάνσεις μπορούν να αγνοηθούν. Το όριο $N \rightarrow \infty$ ονομάζεται το **θερμοδυναμικό όριο** και το ενδιαφέρον μας συνήθως εστιάζεται στην συμπεριφορά του συστήματος στο όριο αυτό. Στην πράξη, ενώ τα συστήματα στο εργαστήριο είναι τις περισσότερες φορές πολύ κοντά στο όριο αυτό, στις προσομοιώσεις μας πολύ συχνά δεν είναι δυνατόν να μελετήσουμε αρκετά μεγάλα συστήματα. Η όλη τέχνη επικεντρώνεται στο σχεδιασμό αλγορίθμων προσομοίωσης και μεθόδων ανάλυσης ;έτσι ώστε να έχουμε εμπιστοσύνη ότι τα αποτελέσματά μας αντανακλούν τη συμπεριφορά του συστήματος στο θερμοδυναμικό όριο.

Η συνάρτηση επιμερισμού κωδικοποιεί λόγω του ορισμού (1.7) όλη τη στατιστική πληροφορία για το σύστημα, μια που δεν είναι μια απλή συνάρτηση μίας μεταβλητής (της β) αλλά απαριθμεί με σχετικό βάρος τις δυνατές καταστάσεις του συστήματος. Απλό παράδειγμα αποτελεί ο υπολογισμός μέσω αυτής της μέσης ενέργειας $\langle E \rangle$ (εσωτερικής ενέργειας U στη θερμοδυναμική) του συστήματος:

$$\begin{aligned} U &\equiv \langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \sum_{\mu} \frac{\partial}{\partial \beta} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \\ &= -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} \end{aligned} \quad (1.10)$$

Με τον ίδιο τρόπο μπορεί κανείς να υπολογίσει την ειδική θερμότητα

$$C = \frac{\partial U}{\partial T} = \frac{\partial \beta}{\partial T} \frac{\partial U}{\partial \beta} = (-k\beta^2) \left(-\frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \right) = k\beta^2 \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2} \quad (1.11)$$

1.2 ΕΝΤΡΟΠΙΑ

Από τη θερμοδυναμική ορίζουμε ότι η εντροπία S θερμοδυναμικού συστήματος ορίζεται από τη σχέση

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T}, \quad F = U - TS, \quad (1.12)$$

όπου F Θα επιχειρήσουμε τώρα να δώσουμε ορισμούς που να είναι συνεπείς με τους παραπάνω και να προκύπτουν από τις μικροσκοπικές καταστάσεις του συστήματος.

Ορίζουμε την ελεύθερη ενέργεια από τη σχέση

$$e^{-\beta F} = Z \equiv \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} \quad (1.13)$$

ή ισοδύναμα

$$F = -\frac{1}{\beta} \ln Z \quad (1.14)$$

Παρατηρήστε ότι ο παραπάνω ορισμός της F ταυτίζεται με την ενέργεια θεμελιώδους κατάστασης για $T \rightarrow 0^1$. Πράγματι τότε $\beta \rightarrow \infty$ και ο μόνος όρος που επιζεί στο άθροισμα (1.13) είναι ο πρώτος. Για τον λόγο αυτό από την (1.12) θα έχουμε $\lim_{T \rightarrow 0} S = 0$ που είναι ο δεύτερος νόμος της θερμοδυναμικής.

Ο ορισμός (1.13) είναι συνεπής με την (1.12) γιατί

$$U = -\frac{\partial \ln Z}{\partial \beta} = -\frac{\partial}{\partial \beta}(-\beta F) = F + \beta \frac{\partial F}{\partial \beta} = F - T \frac{\partial F}{\partial T} = F + TS. \quad (1.15)$$

Η ούνηση της εντροπίας S με τη μικροφυσική γίνεται με τις σχέσεις (1.13) και (1.12) :

$$\frac{S}{k} = \frac{U - F}{kT} = \beta(U - F) = \beta \left(\sum_{\mu} p_{\mu} E_{\mu} + \frac{1}{\beta} \ln Z \right). \quad (1.16)$$

Αλλά

$$p_{\mu} = \frac{e^{-\beta E_{\mu}}}{Z} \Rightarrow E_{\mu} = -\frac{1}{\beta} (\ln p_{\mu} + \ln Z), \quad (1.17)$$

οπότε

$$\begin{aligned} \frac{S}{k} &= \beta \sum_{\mu} \left(-\frac{1}{\beta} (\ln p_{\mu} + \ln Z) p_{\mu} + \frac{1}{\beta} \ln Z \right) \\ &= -\sum_{\mu} p_{\mu} \ln p_{\mu} - \ln Z \sum_{\mu} p_{\mu} + \ln Z \\ &= -\sum_{\mu} p_{\mu} \ln p_{\mu}. \end{aligned} \quad (1.18)$$

Τελικά

$$S = -k \sum_{\mu} p_{\mu} \ln p_{\mu} \quad (1.19)$$

¹Δηλ. δεν υπάρχει αυθόρμητο σπάσιμο συμμετρίας που οδηγεί σε εκφυλισμό της ενέργειας θεμελιώδους κατάστασης

Ας κάνουμε μία διερεύνηση του παραπάνω τύπου. Ας υποθέσουμε ότι ένα (ομολογουμένως αουνήθιο²) ούστημα όλες οι καταστάσεις έχουν την ίδια ενέργεια. Στην περίπτωση αυτή με απλή αντικατάσταση στην εξίσωση (1.19) παίρνουμε ότι

$$p_\mu = \frac{1}{g} = \text{σταθ.} \Rightarrow S = k \ln g. \quad (1.20)$$

Δηλαδή η εντροπία μετράει τον αριθμό των καταστάσεων του ουστήματος, όπως ακριβώς και στην περίπτωση της μικροκανονικής συλλογής. Πράγματι η τελευταία σχέση προκύπτει και για την κατανομή

$$p_\mu = \begin{cases} \frac{1}{g(E)} & E_\mu = E \\ 0 & E_\mu \neq E \end{cases} \quad (1.21)$$

που μπορεί να θεωρηθεί πως δίνει την μικροκανονική συλλογή αφού βάζει τον περιορισμό $E_\mu = E = \text{σταθ.}$. Η συνάρτηση $g(E)$ (σε πολλά βιβλία συμβολίζεται με $\Omega(E)$) μετράει τον αριθμό των καταστάσεων με ενέργεια ίση με E . Από αυτή προκύπτει η πιθανότητα $p(E)$ το ούστημα να βρεθεί να έχει ενέργεια E

$$p(E) = \langle \delta_{E,E_\mu} \rangle = \sum_\mu p_\mu \delta_{E,E_\mu} = \frac{1}{Z} \sum e^{-\beta E_\mu} \delta_{E,E_\mu} = \frac{1}{Z} e^{-\beta E} \sum \delta_{E,E_\mu}. \quad (1.22)$$

Επειδή προφανώς $\sum_\mu \delta_{E,E_\mu} = g(E)$ παίρνουμε

$$p(E) = \langle \delta_{E,E_\mu} \rangle = \frac{g(E) e^{-\beta E}}{Z}. \quad (1.23)$$

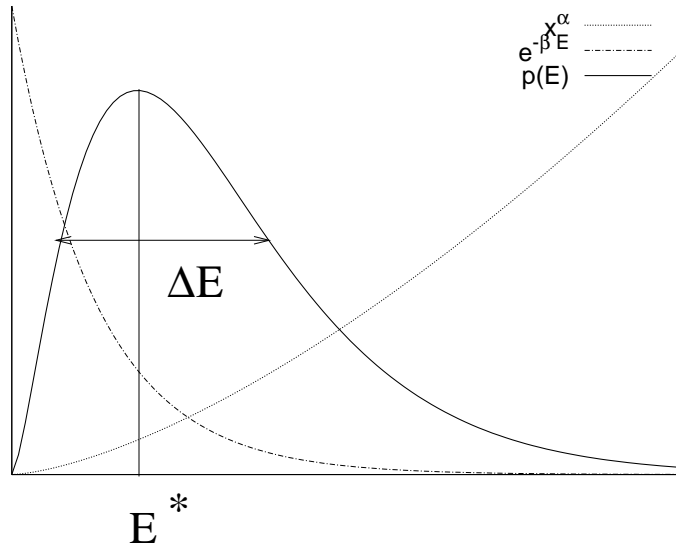
Για ένα τυπικό ούστημα σαν αυτά που θα μελετήσουμε ισχύει

$$g(E) \sim E^{\alpha N} \quad (1.24)$$

όπου N ο αριθμός των βαθμών ελευθερίας του ουστήματος και α μια σταθερά. Για παράδειγμα $\alpha = 3/2$ για το ιδανικό αέριο. Η ποιοτική συμπεριφορά της κατανομής (1.24) φαίνεται στο Σχήμα 1.2. Γενικά παρατηρούμε ότι οι πιθανές τιμές της ενέργειας επικεντρώνονται γύρω από μια τιμή E^* και η απόκλιση ΔE είναι ένα μέτρο της διασποράς των τιμών που όπως θα δείξουμε παρακάτω ο λόγος $\Delta E/E$ μειώνεται με το N με χαρακτηριστική συμπεριφορά $1/\sqrt{N}$. Πράγματι η συνάρτηση (ανάλογη της $p(E)$)

$$\tilde{p}(E) = E^{\alpha N} e^{-\beta E} = e^{-\beta E - \alpha N \ln E} \quad (1.25)$$

²π.χ. η διδιάστατη κβαντική βαρύτητα απουσία ύλης



Σχήμα 1.1: Η πιθανότητα $p(E)$ όπως προκύπτει από τον ανταγωνισμό του παράγοντα Boltzmann $e^{-\beta E}$ και της πυκνότητας καταστάσεων $g(E) \sim E^{\alpha N}$ για μία τυπική περίπτωση.

έχει μέγιστο όταν

$$\left. \frac{\partial \ln \tilde{p}(E)}{\partial E} \right|_{E=E^*} = 0 \Rightarrow \left. \frac{\partial}{\partial E} (-\beta E + \alpha N \ln E) \right|_{E=E^*} = -\beta + \frac{\alpha N}{E^*} = 0 \quad (1.26)$$

ή

$$E^* = \frac{\alpha}{\beta} N. \quad (1.27)$$

Το E^* μετατοπίζεται προς μεγαλύτερες τιμές με την αύξηση της θερμοκρασίας (μείωση του β) και είναι όπως αναμένεται ανάλογο του μεγέθους του συστήματος. Αναπτύσσοντας κατά Taylor

$$\begin{aligned} \ln \tilde{p}(E) &= \ln \tilde{p}(E^*) + (E - E^*) \left. \frac{\partial \ln \tilde{p}(E)}{\partial E} \right|_{E=E^*} + \frac{1}{2} (E - E^*)^2 \left. \frac{\partial^2 \ln \tilde{p}(E)}{\partial E^2} \right|_{E=E^*} + \dots \\ &= \ln \tilde{p}(E^*) + \frac{1}{2} (E - E^*)^2 \left(-\frac{\alpha N}{(E^*)^2} \right) + \dots \end{aligned} \quad (1.28)$$

όπου χρησιμοποιήσαμε την συνθήκη (1.26) και υπολογίσαμε την $\left. \frac{\partial^2 \ln \tilde{p}(E)}{\partial E^2} \right|_{E=E^*}$. Οπότε προκύπτει ότι

$$p(E) \approx p(E^*) e^{-\alpha N \frac{(E - E^*)^2}{2(E^*)^2}} \quad (1.29)$$

Η παραπάνω κατανομή είναι Gaussian με τυπική απόκλιση

$$\Delta E \sim \sqrt{\frac{(E^*)^2}{\alpha N}} = \sqrt{\frac{(\frac{\alpha N}{\beta})^2}{\alpha N}} \sim \frac{\sqrt{N}}{\beta} \quad (1.30)$$

όπου κρατήσαμε μόνο την εξάρτηση από το μέγεθος του συστήματος N και τη θερμοκρασία β . Οπότε πράγματι επιβεβαιώνουμε τη σχέση (1.9) ότι

$$\frac{\Delta E}{E^*} \sim \frac{\frac{\sqrt{N}}{\beta}}{\frac{N}{\beta}} = \frac{1}{\sqrt{N}}. \quad (1.31)$$

Η παραπάνω ανάλυση υπέθεσε αναλυτική συμπεριφορά (ανάπτυγμα Taylor, σχέση (1.28)) η οποία δεν ισχύει όταν είμαστε σε ένα κρίσιμο σημείο μιας μετάβασης φάσης.

Μια άλλη σημαντική περίπτωση που η παραπάνω ανάλυση δεν ισχύει είναι όταν η κατανομή $p(E)$ έχει παραπάνω από ένα μέγιστα³. Αυτό συμβαίνει όταν το σύστημα υπόκειται σε μετάβαση φάσης πρώτης τάξης, π.χ. όταν ο πάγος γίνεται νερό ή όταν ένα μαγνητικό υλικό που βρίσκεται σε ένα μαγνητικό πεδίο χάσει τη μαγνητιότητά του λόγω αύξησης της θερμοκρασίας του. Στην περίπτωση αυτή οι δύο καταστάσεις πάγος-νερό/μαγνήτης-παραμαγνήτης έχουν την ίδια πιθανότητα εμφάνισης (“συνυπάρχουν”) και μία τυπική κατανομή με δομή δύο κορυφών φαίνεται στο Σχήμα 1.2

1.3 ΔΙΑΚΥΜΑΝΣΕΙΣ

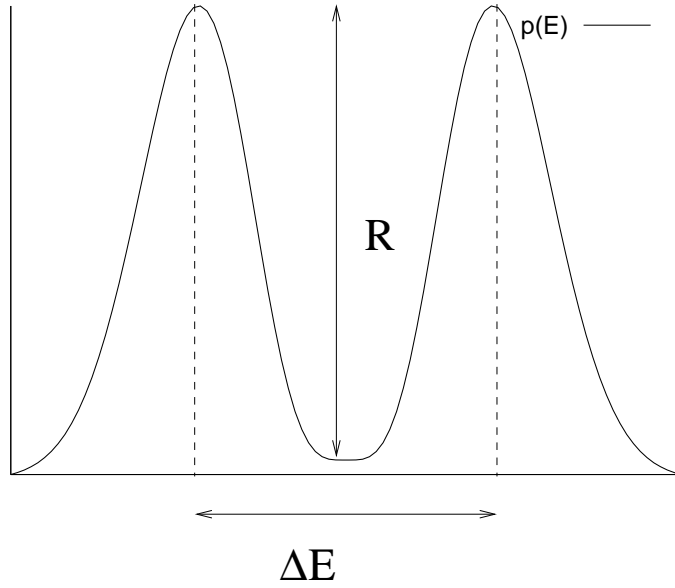
Κάθε παρατηρήσιμη ποσότητα Q έχει στοχαστική συμπεριφορά σύμφωνα με μια κατανομή πιθανότητας $p(Q)$ που προκύπτει από την κατανομή Boltzmann (1.6). Μια τέτοια κατανομή χαρακτηρίζεται πλήρως από τη μέση τιμή $\langle Q \rangle$ και τις ροπές ανώτερης τάξης, δηλ. τις μέσες τιμές $\langle (Q - \langle Q \rangle)^n \rangle$, $n = 1, 2, 3, \dots$. Η πιο χρήσιμη ποσότητα από αυτές δίνεται από τη διακύμανση γύρω από τη μέση τιμή για $n = 2$

$$(\Delta Q)^2 \equiv \langle (Q - \langle Q \rangle)^2 \rangle = \langle Q^2 \rangle - \langle Q \rangle^2. \quad (1.32)$$

Η ποσότητα αυτή δίνει τις περισσότερες φορές ένα μέτρο της απόκλισης της Q από τη μέση τιμή της $\langle Q \rangle$. Για την περίπτωση της ενέργειας $Q = E$ παίρνουμε

$$(\Delta E)^2 \equiv \langle (E - \langle E \rangle)^2 \rangle = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2, \quad (1.33)$$

³Όταν έχει περισσότερα από ένα τοπικά ελάχιστα, το ολικό ελάχιστο επικρατεί των υπολοίπων στο θερμοδυναμικό όριο $N \rightarrow \infty$.



Σχήμα 1.2: Η πιθανότητα $p(E)$ με δομή δύο κορυφών σε σύστημα με μετάβαση φάσης 1ης τάξης. Τα δύο μέγιστα αντιστοιχούν στις δύο συνυπάρχουσες καταστάσεις (“πάγος”–“νερό”) και $\Delta E/N$ αντιστοιχεί στη λανθάνουσα θερμότητα (latent heat). Στο θερμοδυναμικό όριο $N \rightarrow \infty$ το χάσμα R γίνεται μεγαλύτερο, συνήθως σαν $R \sim e^{-fA}$ όπου A η ελάχιστη επιφάνεια που χωρίζει τις δύο φάσεις και f η διεπαφική τάση (interface tension).

και από τις σχέσεις

$$\langle E^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu}^2 e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2}{\partial \beta^2} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} \quad (1.34)$$

και

$$\langle E \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} E_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial \beta} \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu}} = -\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \quad (1.35)$$

προκύπτει ότι

$$(\Delta E)^2 = \langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2 = \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial \beta^2} - \left(-\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial \beta} \right)^2 = \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial \beta^2}. \quad (1.36)$$

που σύμφωνα με τη σχέση (1.11) είναι η ειδική θερμότητα

$$C = \frac{\partial \langle E \rangle}{\partial T} = k\beta^2 (\Delta E)^2. \quad (1.37)$$

Αρα καταλήγουμε στο ενδιαφέρον συμπέρασμα ότι η ειδική θερμότητα ενός ουστήματος (θερμοδυναμική ποσότητα) συνδέεται άμεσα με τις μικροσκοπικές στατιστικές διακυμάνσεις της ενέργειας του ουστήματος. Αυτό είναι γνωστό σαν το θεώρημα γραμμικής απόκρισης (linear response theorem) και ισχύει γενικά για οποιαδήποτε ποσότητα έχει γραμμική σύζευξη με το ούστημα.

Μια τέτοια ποσότητα για ένα μαγνητικό ούστημα που βρίσκεται μέσα σε ομογενές μαγνητικό πεδίο B είναι η μαγνήτιση M . Αν M_μ είναι η μαγνήτιση του ουστήματος στην κατάσταση μ και υποθέσουμε ότι είναι στην διεύθυνση του \vec{B} τότε η Hamiltonian του ουστήματος γίνεται

$$H = E - BM \quad (1.38)$$

και η συνάρτηση επιμερισμού

$$Z = \sum_{\mu} e^{-\beta E_{\mu} - \beta BM_{\mu}}. \quad (1.39)$$

Ο όρος “γραμμική σύζευξη” οφείλεται στη γραμμική απόκριση του ουστήματος στο μαγνητικό πεδίο δηλ. στον όρο BM που είναι γραμμικός στη μαγνήτιση M . Οι ποσότητες B και M ονομάζονται συζυγείς. Παρόμοια σχέση έχουν η όγκος/πίεση (V/P) σε ένα αέριο ή το χημικό δυναμικό/αριθμός σωματιδίων (μ/N) στη μεγαλοκανονική συλλογή.

Εξ' αιτίας αυτής της γραμμικής σύζευξης παίρνουμε

$$\langle M \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} M_{\mu} e^{-\beta M_{\mu} + \beta BM_{\mu}} = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial B} = -\frac{\partial F}{\partial B} \quad (1.40)$$

σχέση που είναι ανάλογη με την (1.10). Η αντίστοιχη της (1.36) προκύπτει από (1.32) για $Q = M$

$$(\Delta M)^2 \equiv \langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle = \langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2, \quad (1.41)$$

και από

$$\langle M^2 \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\mu} M_{\mu}^2 e^{-\beta M_{\mu} + \beta BM_{\mu}} = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2}, \quad (1.42)$$

οπότε

$$(\Delta M)^2 = \frac{1}{\beta^2} \left\{ \frac{1}{Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial B^2} - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial B} \right)^2 \right\} = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B^2} = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B}. \quad (1.43)$$

Η μαγνητική επιδεκτικότητα χ ορίζεται από τη σχέση

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial \langle M \rangle}{\partial B} = \frac{\beta}{N} \left(\langle (M - \langle M \rangle)^2 \rangle \right) \quad (1.44)$$

και σχετίζεται άμεσα με τις διακυμάνσεις της μαγνήτισης. Η παραπάνω ανάλυση μπορεί να γίνει πανομοιότυπα για οποιοδήποτε ζεύγος συζυγών ποσοτήτων.

1.4 ΣΥΝΑΡΤΗΣΕΙΣ ΣΥΣΧΕΤΙΣΜΟΥ

Οι συναρτήσεις συσχέτισμού προκύπτουν από τη συζήτηση της προηγούμενης παραγράφου όταν θεωρήσουμε μαγνητικά πεδία τα οποία όμως έχουν τιμή που εξαρτάται από τη θέση στο χώρο που θεωρούμε μέσα στο σύστημα. Για λόγους απλότητας (αλλά και επειδή πρόκειται να μελετήσουμε μόνο τέτοια συστήματα) το σύστημα μας βρίσκεται μέσα σε ένα “χώρο” στον οποίο οι δυνατές θέσεις είναι οι διακριτές θέσεις ενός πλέγματος τις οποίες αντιστοιχούμε σε φυσικούς αριθμούς⁴ $i = 1, \dots, N$. Τότε το μαγνητικό πεδίο θα είναι συνάρτηση της θέσης στο πλέγμα B_i και αλληλεπιδρά με το spin s_i

$$H = E - \sum_i B_i s_i \quad (1.45)$$

και η μαγνήτιση $m_i \equiv s_i$ ⁵ στη θέση πλέγματος i είναι

$$\langle s_i \rangle = \frac{1}{\beta} \frac{\partial \ln Z}{\partial B_i} \quad (1.46)$$

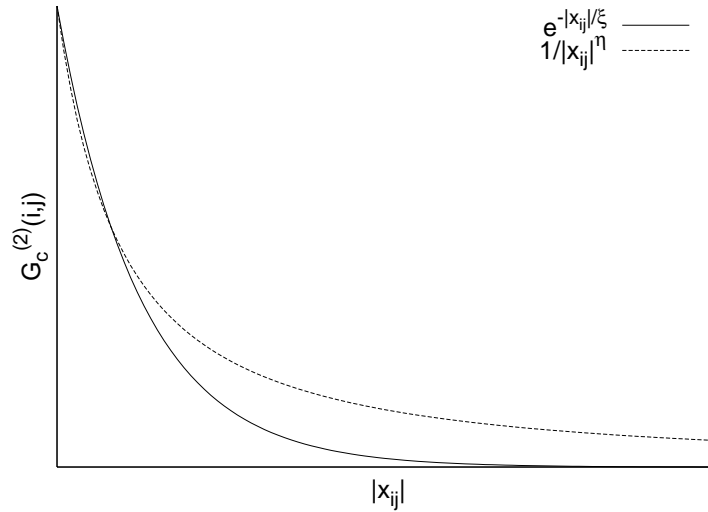
και η συνάρτηση συσχέτισμού δύο σημείων (connected two point correlation function) ορίζεται ως

$$G_c^{(2)}(i, j) = \langle (s_i - \langle s_i \rangle)(s_j - \langle s_j \rangle) \rangle = \langle s_i s_j \rangle - \langle s_i \rangle \langle s_j \rangle = \frac{1}{\beta^2} \frac{\partial^2 \ln Z}{\partial B_i \partial B_j}. \quad (1.47)$$

Η παραπάνω συνάρτηση αυτή έχει μεγάλη θετική τιμή όταν οι τιμές s_i, s_j είναι ισχυρά συσχετισμένες, δηλ. “μεταβάλλονται μαζί” στα τυχαία δείγματα που παίρνουμε από το σύστημα, ενώ αντίθετα είναι σχεδόν μηδέν όταν η τιμή της s_i δεν εξαρτάται ελάχιστα από την s_j (αυσχετίστες τυχαίες μεταβλητές). Υπάρχει φυσικά και η περίπτωση οι s_i, s_j να είναι ισχυρά αντι-συσχετισμένες και η συνάρτηση συσχέτισμού να είναι αρνητική.

⁴Οι βαθμοί ελευθερίας που αναφέραμε προηγουμένως μπορεί να είναι περισσότεροι από N

⁵Οι δύο φυσικές ποσότητες είναι διαφορετικές αλλά ανάλογες. Εδώ απλά αγνοούμε τη σταθερά αναλογίας.



Σχήμα 1.3: Η συνάρτηση συσχέτισης $G_c^{(2)}(i, j)$ για $\xi < \infty$ και $\xi \rightarrow \infty$

Η συνάρτηση συσχέτισης $G_c^{(2)}(i, j)$ παίρνει τη μέγιστη τιμή της $\langle (s_i - \langle s_i \rangle)^2 \rangle$ για $i = j$. Στη συνέχεια πέφτει γρήγορα κατά απόλυτη τιμή. Για ένα ούνηθες ούστημα

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim e^{-|x_{ij}|/\xi}, \quad (1.48)$$

όπου $|x_{ij}|$ η απόσταση των σημείων i, j . ξ είναι ένα χαρακτηριστικό μήκος για το ούστημα που δίνει ένα μέτρο σε πόση απόσταση υπάρχει ουσιαστικός συσχετισμός μεταξύ των τιμών της μαγνήτισης σε δύο πλεγματικές θέσεις. Εξαρτάται από τις παραμέτρους που ορίζουν το ούστημα $\xi = \xi(\beta, B, N, \dots)$. Είναι σημαντικό να κατανοηθεί ότι το μήκος συσχέτισης ορίζει μια κλίμακα μήκους που προκύπτει δυναμικά και όχι από τον ορισμό του συστήματος όπως λ.χ. το μέγεθος L του συστήματος ή η απόσταση a μεταξύ δύο πλεγματικών σημείων (πλεγματική σταθερά). Συνήθως το ξ είναι της τάξης μεγέθους της πλεγματικής σταθεράς a και το ούστημα δεν παρουσιάζει συσχετισμούς σε μακροσκοπικές κλίμακες (δηλ. της τάξης του L).

Πολύ ενδιαφέροντα φυσικά προκύπτει όταν ρυθμίσουμε με λεπτότητα τις παραμέτρους από τις οποίες εξαρτάται το ξ έτσι ώστε $\xi \rightarrow \infty$ (στην πράξη $\xi \approx L$). Αυτό γίνεται στην περιοχή μίας συνεχούς (όχι πρώτης τάξης) μετάβασης φάσης. Στην περίπτωση αυτή η εκθετική συμπεριφορά χάνεται και έχουμε πολύ

βραδύτερη πτώση της $G_c^{(2)}(i, j)$ (βλ. Σχήμα 1.4), συνήθως

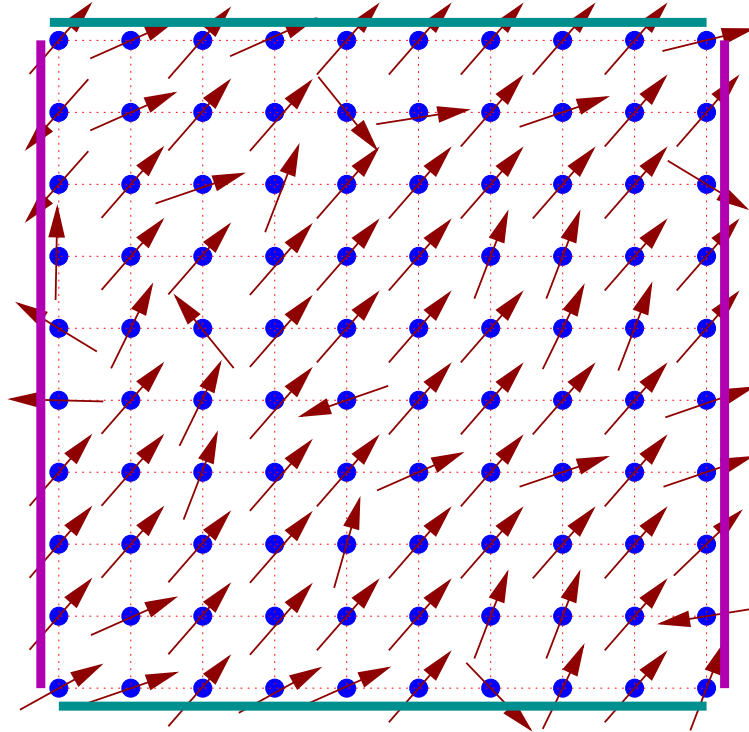
$$G_c^{(2)}(i, j) \sim \frac{1}{|x_{ij}|^\eta}. \quad (1.49)$$

Καθώς πλησιάζουμε την περίπτωση αυτή, συμβαίνει οι συσχετισμοί να εκτείνονται σε αποστάσεις $|x_{ij}| \gg a$. Τότε το σύστημα πάει να “βλέπει” τις λεπτομέρειες του πλέγματος και συμπεριφέρεται με πολύ καλή προσέγγιση σαν το πλέγμα να ήταν ένας συνεχής χώρος. Το όριο αυτό αναφέρεται ως το “συνεχές όριο” (continuum limit) μιας θεωρίας που ορίζεται σε ένα πλέγμα. Εξ’ατίας του ότι η λεπτομέρεια του πλέγματος γίνονται ασήμαντες στο όριο αυτό, θεωρίες που ορίζονται μικροσκοπικά με διαφορετικό τρόπο (λ.χ. μια σε τετραγωνικό πλέγμα και μία σε εξαγωνικό) έχουν το ίδιο συνεχές όριο. Το φαινόμενο αυτό ονομάζεται παγκοσμιότητα (universality) και παίζει κεντρικό ρόλο στη μελέτη στατιστικών ουσιωμάτων καθώς και στην κβαντική θεωρία πεδίου.

1.5 ΠΡΟΤΥΠΟ ISING

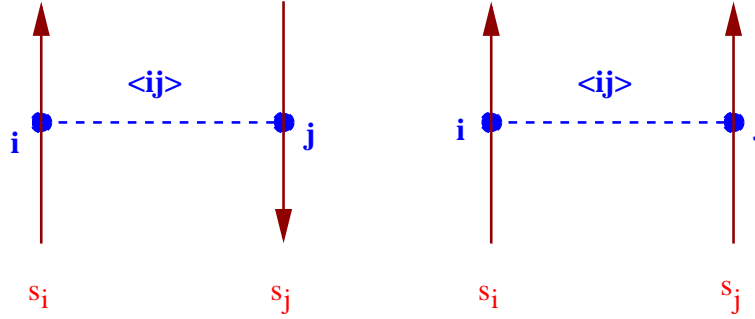
Το πρότυπο Ising (1925) [7] έχει παίξει ιστορικά πολύ σημαντικό ρόλο στις εξελίξεις των ιδεών της στατιστικής φυσικής και της θεωρίας πεδίου. Ειδικότερα το πρότυπο στις δύο διαστάσεις είναι αρκετά σύνθετο ώστε να έχει ενδιαφέρουσες μη τετριμμένες ιδιότητες και αρκετά απλό ώστε να μπορούμε να αντλήσουμε πολύτιμες πληροφορίες για τη φυσική των μεταβάσεων φάσης. Το πρότυπο εκδηλώνει μετάβαση φάσης 2ης τάξης με αποτέλεσμα να μπορούν να μελετηθούν οι ιδιότητες των συνεχών μεταβάσεων φάσης (κρίσιμοι εκθέτες, παγκοσμιότητα, ομάδα επανακανονικοποίησης, συνεχές όριο). Με την αναλυτική λύση του Onsager (1948) [8] και άλλων παίρνουμε αποτελέσματα με τα οποία μπορούμε να ελέγξουμε προσεγγιστικές μεθόδους, όπως οι προσομοιώσεις Μόντε Κάρλο, θεωρία διαταραχών, mean field theory κλπ. Επί πλέον έχει και φυσικό ενδιαφέρον μια και είναι ένα πρότυπο ενός μαγνητικού υλικού που παρ’ όλη την απλότητά του περιγράφει ποιοτικά πολλές από τις μη τετριμμένες ιδιότητες τους. Επίσης λόγω της παγκοσμιότητας μπορεί να θεωρηθεί πρότυπο για μετάβαση φάσης σε υγρό-αέριο (τριπλό σημείο) απεικονίζεται στο Coulomb Gas Εξαιρετο βιβλίο για πρότυπα της στατιστικής φυσικής που λύνονται επακριβώς με αναλυτικές μεθόδους αποτελεί το βιβλίο του Baxter [6].

Για τον ορισμό του προτύπου θεωρήστε ένα διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα όπως αυτό του Σχήματος 1.5 στο οποίο τοποθετείτε σε κάθε πλεγματοειδή θέση (node) “άτομα” ή “μαγνητάκια” με σπιν s_i . Η γεωμετρία καθορίζεται από



Σχήμα 1.4: Διδιάστατο τετραγωνικό πλέγμα του οποίου οι θέσεις $i = 1, \dots, N$ καταλαμβάνονται από “άτομα” ή “μαγνητάκια” με σπιν s_i οποία εδώ έχουν τυχαίο προσανατολισμό στο επίπεδο (πρότυπο XY). Συνήθως λαμβάνονται υπ’ όψη μόνο οι αλληλεπιδράσεις πλησιεστέρων γειτόνων $-J \vec{s}_i \cdot \vec{s}_j$ για κάθε σύνδεσμο $\langle ij \rangle$. Η τοπολογία είναι τοροϊδής (toroidal) όταν ταυτίσουμε τις οριζόντιες πλευρές μεταξύ τους και τις κάθετες μεταξύ τους, δηλ. τα ίδια χρώματα στο σχήμα.

την ελάχιστη απόσταση μεταξύ γειτόνων, την πλεγματική σταθερά a , και τον αριθμό των πλεγματικών θέσεων N . Σε κάθε πλευρά έχουμε L πλεγματικές θέσεις έτσι ώστε $N = L \times L = L^d$ με $d = 2$ τη διάσταση του χώρου. Η τοπολογία καθορίζεται από τις σχέσεις γειτονίας, και ιδιαίτερα από τις σχέσεις γειτονίας των πλεγματικών θέσεων που βρίσκονται στο σύνορο του τετραγώνου. Η τοροϊδής τοπολογία λαμβάνεται αν δημιουργήσουμε δεσμό μεταξύ των γειτόνων που ανήκουν στις κάθετες και οριζόντιες πλευρές του τετραγώνου το Σχήματος (1.5). Η δυναμική του συστήματος καθορίζεται από τη μαγνητική αλληλεπίδραση (spin-spin interaction) την οποία απλοποιούμε να είναι κοντινής εμβέλειας και ιδιαίτερα μόνο μεταξύ των πλησιεστέρων γειτόνων.



Σχήμα 1.5: Τα σπιν στο πρότυπο Ising παίρνουν δύο μόνο τιμές “πάνω” και “κάτω” και η ενέργεια του συστήματος προκύπτει από τη συνεισφορά κάθε συνδεσμού (link) $\langle ij \rangle$. Αυτή για το σιδηρομαγνητικό πρότυπο παίρνει δύο δυνατές τιμές $+J$ και $-J$ για αντίρροπα και ομόρροπα σπιν αντίστοιχα. Το σύστημα έχει τη συμμετρία της διακριτής ομάδας Z_2 .

Στο σιδηρομαγνητικό πρότυπο Ising θεωρούμε τις δυνατές τιμές των σπιν να είναι δύο, “πάνω” και “κάτω” ή $+1$ και -1 . Στην πιο απλή περίπτωση η αλληλεπίδραση είναι αλληλεπίδραση σπιν–σπιν μόνο μεταξύ πλησιεστέρων γειτόνων με την κατάσταση με τα σπιν ομόρροπα να έχει τη χαμηλότερη ενέργεια⁶. Αυτό απεικονίζεται στο Σχήμα 1.5. Το σύστημα μπορεί να βρίσκεται υπό την επίδραση ομογενούς μαγνητικού πεδίου B του οποίου η διεύθυνση θεωρείται να είναι παράλληλη ή αντιπαράλληλη με αυτή των σπιν. Είμαστε τώρα έτοιμοι να γράψουμε την Hamiltonian και τη συνάρτηση επιμερισμού του συστήματος.

Θεωρούμε τετραγωνικό πλέγμα από N πλεγματικές θέσεις (sites ή vertices) διατεταγμένες σε τετράγωνο με πλευρές με L πλεγματικές θέσεις τις οποίες απαριθμούμε με αριθμούς $i = 1, 2, \dots, N$. Το πλέγμα έχει N_l δεσμούς (bonds ή links) μεταξύ των πλησιεστέρων γειτόνων. Αυτοί χαρακτηρίζονται από τα ζεύγη των πλεγματικών θέσεων i, j που ενώνουν και θα τους συμβολίζουμε με $\langle ij \rangle$. Ταυτίζουμε τις πλευρές του τετραγώνου όπως στο Σχήμα 1.5. Επειδή τότε κάθε δεσμός ενώνει ακριβώς δύο πλεγματικές θέσεις και από κάθε πλεγματική θέση ξεκινούν ακριβώς τέσσερις δεσμοί θα ισχύει

$$N_l = 4N \Rightarrow N_l = 2N. \quad (1.50)$$

Σε κάθε πλεγματική θέση τοποθετούμε σπιν $s_i = \pm 1$.

Η Hamiltonian του συστήματος θα δίνεται από τη σχέση

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j - B \sum_i s_i. \quad (1.51)$$

⁶Το αντίστροφο ισχύει για το αντισιδηρομαγνητικό πρότυπο Ising.

Ο πρώτος όρος δίνει την αλληλεπίδραση μεταξύ των σπιν και για $J > 0$ – το οποίο υποθέτουμε στο βιβλίο αυτό – το σύστημα είναι σιδηρομαγνητικό. Κάθε δεσμός που ενώνει ομόρροπα σπιν έχει ενέργεια $-J$ που είναι κατά $2J$ μικρότερη από ένα δεσμό με αντίρροπα σπιν. Το σύστημα ενεργειακά προτιμά καταστάσεις με δεσμούς ομόρροπους, δηλ. τα σπιν να είναι όλα προσαυτολιωμένα προς την ίδια κατεύθυνση. Η ελάχιστη ενέργεια αντιστοιχεί στη μοναδική⁷ κατάσταση με όλα τα σπιν να κοιτούν προς την κατεύθυνση του B , την θεμελιώδη κατάσταση⁸. Η ενέργειά της είναι

$$E_0 = -JN_l - BN = -(2J + B)N. \quad (1.52)$$

Η συνάρτηση επιμερισμού είναι

$$Z = \sum_{s_1=\pm 1} \sum_{s_2=\pm 1} \dots \sum_{s_N=\pm 1} e^{-\beta H[\{s_i\}]} \equiv \sum_{\{s_i\}} e^{\beta J \sum_{\langle ij \rangle} s_i s_j + \beta B \sum_i s_i}, \quad (1.53)$$

όπου $\{s_i\} \equiv \{s_1, s_2, \dots, s_N\}$ είναι μια διάταξη (configuration) των σπιν στο πλέγμα. Το παραπάνω άθροισμα μοιάζει απλό να γίνει, ιδιαίτερα όταν $B = 0$, μια και η Hamiltonian παίρνει διακριτές τιμές και απλά μετράει τον αριθμό των ομόρροπων σπιν (δες πρόβλημα 3). Ο αριθμός των όρων του είναι ίσος με τον αριθμό των δυνατών διατάξεων $\{s_i\}$ των σπιν που είναι 2^N , δηλ. αυξάνουν εκθετικά με το N . Για ένα 5×5 πλέγμα ο αριθμός των όρων είναι $2^{25} \approx 3.4 \times 10^6$. Σύμφωνα με τη γνώση του συγγραφέα [?] αυτό είναι και το μεγαλύτερο πλέγμα στο οποίο έχει γίνει απ' ευθείας υπολογισμός του αθροίσματος αυτού.

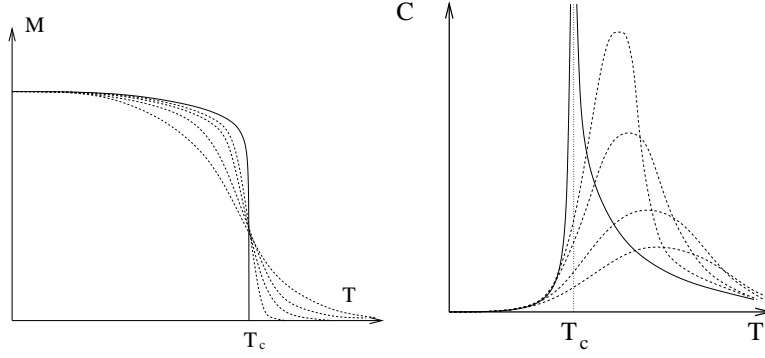
Το διδιάστατο πρότυπο Ising με $B = 0$ έχει την εξαιρετικά ενδιαφέρονσα ιδιότητα ότι για $\beta = \beta_c$ όπου

$$\beta_c = \frac{1}{2} \ln(1 + \sqrt{2}) \approx 0.4406867935 \dots \quad (1.54)$$

το σύστημα παρουσιάζει μετάβαση φάσης από την διατεταγμένη φάση ή φάση χαμηλής θερμοκρασίας όπου το σύστημα είναι μαγνητισμένο ($\langle |M| \rangle > 0$) στην άτακτη φάση ή φάση υψηλής θερμοκρασίας όπου η μαγνήτιση χάνεται ($\langle |M| \rangle = 0$). Η θερμοκρασία β_c είναι η κρίσιμη θερμοκρασία η θερμοκρασία Curie. Η μετάβαση φάσης είναι συνεχής, δευτέρας τάξης, γιατί η συνάρτηση $\langle |M| \rangle(\beta)$ είναι συνεχής για $\beta = \beta_c$ αλλά όχι η παράγωγός της. Αυτό φαίνεται ποικίλα στο Σχήμα 1.5

⁷ Στην περίπτωση του αντισιδηρομαγνητικού συστήματος $J < 0$ η θεμελιώδης ενέργεια είναι εκφυλισμένη και οι αντίστοιχες καταστάσεις είναι πιο πολύπλοκο να περιγραφούν [?]

⁸ Για $B = 0$ το σύστημα έχει “πάνω-κάτω” συμμετρία (συμμετρία Z_2). Δύο καταστάσεις που προκύπτουν με την εφαρμογή της συμμετρίας αυτής (αντιστροφή όλων των σπιν) ταυτίζονται.



Σχήμα 1.6: Ποιοτική συμπεριφορά της μαγνήτισης (αριστερά) και της ειδικής θερμότητας (δεξιά) στην μετάβαση φάσης στο πρότυπο Ising. Με συνεχή γραμμή δειχνεται η (μη αναλυτική) συμπεριφορά στο θερμοδυναμικό όριο ενώ με διακεκομμένες η συμπεριφορά για αυξανόμενο αλλά πεπερασμένο μέγεθος N του συστήματος. Οι τελευταίες συγκλίνουν ομοιόμορφα προς τις μη αναλυτικές συναρτήσεις.

Για $\beta \neq \beta_c$ η συνάρτηση συσχέτισμού (1.47) συμπεριφέρονται όπως στη σχέση (1.48) με πεπερασμένο μήκος συσχέτισμού $\xi(\beta)$. Καθώς πλησιάζουμε την κρίσιμη θερμοκρασία το μήκος συσχέτισμού τείνει στο άπειρο και μάλιστα συμπεριφέρεται ασυμπτωτικά σαν

$$\xi(\beta) \equiv \xi(t) \sim |t|^{-\nu} \quad t = \frac{\beta_c - \beta}{\beta_c}. \quad (1.55)$$

Η συνάρτηση συσχέτισμού συμπεριφέρεται σύμφωνα με την εξίσωση (1.49)

$$G_c^{(2)}(i, j) \sim \frac{1}{|x_{ij}|^\eta}. \quad (1.56)$$

ενώ παρόμοια συμπεριφορά βάρθρωσης (scaling) παρουσιάζουν και η ειδική θερμότητα C , μαγνήτιση $M \equiv \langle M \rangle$ και μαγνητική επιδεκτικότητα χ σύμφωνα με τις σχέσεις

$$C \sim |t|^{-\alpha} \quad (1.57)$$

$$M \sim |t|^\beta \quad (1.58)$$

$$\chi \sim |t|^\gamma. \quad (1.59)$$

ενώ η μαγνήτιση για $t = 0$ και μαγνητικό πεδίο $B \neq 0$ συμπεριφέρεται σύμφωνα με τη σχέση

$$M \sim B^{-1/\delta}. \quad (1.60)$$

Οι εκθέτες που παρουσιάζονται στις παραπάνω σχέσεις λέγονται κρίσιμοι εκθέτες ή εκθέτες βάρθρωσης (critical ή scaling exponents) και οι τιμές τους παρουσιάζουν την ιδιότητα της παγκοσμιοτητας. Δηλ. οι τιμές τους δεν εξαρτώνται από τις λεπτομέρειες του πλέγματος (τετραγωνικό, τριγωνικό κλπ) ή της αλληλεπίδρασης (πλησιεστέρων ή μη γειτόνων, μεγαλύτερες δυνάμεις του σπιν κλπ) και μιά ολόκληρη κλάση από πρότυπα έχουν την ίδια συμπεριφορά! Αρκεί τα πρότυπα αυτά να έχουν τις ίδιες ιδιότητες συμμετρίας, να ορίζονται σε χώρο ίδιας διάστασης και οι αλληλεπιδράσεις να είναι κοντινής εμβέλειας. Στο συγκεκριμένο πρότυπο οι εκθέτες παίρνουν τις λεγόμενες τιμές Onsager

$$\begin{aligned} \alpha &= 0 \\ \beta &= \frac{1}{8} \\ \gamma &= \frac{7}{4} \\ \delta &= 15 \\ \nu &= 1 \\ \eta &= \frac{1}{4} \end{aligned} \tag{1.61}$$

Η συμπεριφορά (1.55–1.60) χαρακτηρίζεται από τη μη αναλυτικότητα των αντίστοιχων συναρτήσεων. Αυτή δεν είναι δυνατόν να προκύψει από την συνάρτηση επιμερισμού (1.53) για πλέγμα με N θέσεις μιά και ένα πεπερασμένο άθροισμα από εκθετικά είναι αναγκαστικά αναλυτική συνάρτηση (άρα και οι παράγωγοί της). Η μη αναλυτική συμπεριφορά φανερώνεται στο όριο απείρου μεγέθους (θερμοδυναμικό όριο) όπου η παραπάνω συναρτήσεις τείνουν προς μια μη-αναλυτική συνάρτηση όπως στο Σχήμα 1.5. Το χάσιμο της αναλυτικότητας οφείλεται στους συσχετισμούς των σπιν σε μακροσκοπικές αποστάσεις.

Σε πολλά συστήματα που μελετάμε τα παραπάνω μη αναλυτικά σημεία, αναζητούμε μια παράμετρο τάξης (order parameter) η οποία χαρακτηρίζει τη συμμετρία του συστήματος. Στην συγκεκριμένη περίπτωση του πρότυπου Ising η παράμετρος τάξης είναι η μαγνήτιση με τη συμμετρία $s_i \rightarrow -s_i$. Συνήθως στη μία φάση η παράμετρος τάξης είναι μη μηδενική ενώ στην άλλη μηδενίζεται. Αυτό συνεπάγεται μη αναλυτική συμπεριφορά αφού μια αναλυτική συνάρτηση που είναι μηδενική σε ένα διάστημα, είναι παντού μηδεν.

Η συμπεριφορά παγκοσμιοτητας ή ανεξαρτησίας κλίμακας (scale invariance) παρουσιάζεται κάθε φορά που έχουμε απόκλιση του μήκους συσχετισμού ξ . Στην περίπτωση μας για να φτάσουμε το κρίσιμο σημείο έχουμε να ρυθμίσουμε μόνο

μια παράμετρο, τη θερμοκρασία, οπότε αναμένει κανείς να εμφανιστεί μόνο μια καινούργια κλίμακα στο πρότυπο. Ανεξαρτησία κλίμακας εμφανίζεται όταν το μήκος συσχέτισμού γίνει πολύ μεγαλύτερο από τη μικροσκοπική κλίμακα a , οπότε οποιαδήποτε ποσότητα σαν συνάρτηση της απόστασης r μπορεί να εξαρτάται μόνο από το λόγο r/ξ . Η παγκοσμιότητα προκύπτει από το γεγονός ότι στην περίπτωση αυτή φαίνεται τα πάντα να εξαρτώνται από εκείνες τις διακυμάνσεις με μεγάλο μήκος κύματος που απαιτούνται από τη συμμετρία της παραμέτρου τάξης M . Η σημαντική απλούστευση που προκύπτει είναι ότι για να μελετήσουμε ένα πραγματικό φυσικό σύστημα σε μια συνεχή μετάβαση φάσης $\xi \rightarrow \infty$ αρκεί να μελετήσουμε το απλούστερο πρότυπο με τη δεδομένη συμμετρία και (χωρικές) διαστάσεις το οποίο είναι ανεξάρτητο κλίμακας (scale invariant).

1.6 ΠΡΟΒΛΗΜΑΤΑ

1. Αποδείξτε τη σχέση (1.20). Επαναλάβετε για την κατανομή (1.21).
2. Αποδείξτε τη σχέση (1.47).
3. Αποδείξτε τη σχέση (1.50). Βρείτε τις ανάλογες σχέσεις για το αντίστοιχο τριγωνικό και εξαγωνικό πλέγμα.
4. Επαναλάβετε την προηγούμενη άσκηση για το κυβικό πλέγμα στις 3 διαστάσεις. Γενικεύστε για το υπερκυβικό στις d διαστάσεις.
5. Η Hamiltonian του προτύπου Ising για $B = 0$ μπορεί ισοδύναμα να γραφεί σαν

$$H' = -J' \sum_{\langle ij \rangle} \delta_{i,j} \quad (1.62)$$

Βρείτε τη σχέση μεταξύ των J, J', H, H' της σχέσης (1.51) ώστε τα συστήματα να είναι φυσικά ισοδύναμα. Επαναλάβετε το ίδιο και για τη Hamiltonian

$$H'' = -J'' \sum_{\langle ij \rangle} (\delta_{i,j} - 1) \quad (1.63)$$

Παρατηρήστε ότι οι H' και H'' μετρούν ομόρροπους και αντίρροπους δεσμούς αντίστοιχα.

