

8 الوحدة الثامنة

أنظمة الجسيمات المتفاعلة Systems of Interacting Particles

يعرف النظام المثالي في الميكانيك الإحصائي، بنظام مكون من جسيمات (جزيئات، إلكترونات، فوتونات، فونونات أو عزوم مغناطيسية)، لا يؤثر بعضها في بعض بقوى ذات قيمة من هذا المنظور، إن جميع الأنظمة التي درست في الوجدتين السابقتين أنظمة مثالية، لكن العالم سيكون مملًا، لو أن كل شيء فيه كان مثاليًا. فعلى سبيل المثال، لن تتحول الغازات إلى سوائل، ولن تتمغنط المواد تلقائيًا، وعليه فقد حان الوقت للتعامل مع بعض الأنظمة غير المثالية.

ليس أمرًا سهلًا التنبؤ بتصرف نظام غير مثالي، مكون من عدد كبير من الجسيمات المتفاعلة. ولا يمكن أن يجرأ النظام إلى عدد كبير من الأنظمة الأصغر (جسيمات أو حالات)، ومعاملة كل منها على انفراد، ومن ثم الجمع على جميع هذه الأنظمة الصغيرة، على نحو ما فعلنا في الوجدتين السابقتين. عوضًا عن ذلك، فلا بد من التعامل مع النظام كله مرة واحدة. ويعني هذا عادة، أنه لا يمكن حساب كميات الديناميكا الحرارية بدقة، لكن لا بد من اللجوء إلى التقريبات. إن استخدام التقريبات الملائمة للأنظمة المختلفة المكونة من جسيمات متفاعلة أصبح عنصرًا رئيسًا من الميكانيك الإحصائي الحديث. إضافة إلى ذلك، فإن طرق تقريبات مماثلة تستخدم بكثرة في مجالات البحث الأخرى، خصوصًا في تطبيقات ميكانيك الكم للأنظمة متعددة الجسيمات. وفي هذه الوحدة، سنعرض مثالين على الأنظمة المتفاعلة: أولهما، غاز مكون من جزيئات، بينها تفاعل ضعيف، وثانيهما، صف من العزوم المغناطيسية ذات الميل إلى الاصطفاف في اتجاه مواز لاتجاه جيرانها. ولكل واحد من هذين النظامين طريقة تقريب خاصة به (نظرية القلقله ومحاكاة مونت كارلو بالترتيب)، التي لا تحل المسألة المعنية فقط، بل أثبتت قوة في التعامل مع تنوع أوسع من المشكلات في الفيزياء النظرية⁽⁸⁰⁾.

(80) إن جزأي هذه الوحدة مستقلان تمامًا بعضهما عن بعض، ويمكن دراستهما بأي ترتيب. إضافة إلى ذلك، باستثناء بعض الأسئلة، لا شيء في هذه الوحدة يعتمد على الوحدة السابعة.

1.3 الغازات ضعيفة التفاعل Weakly Interacting Particles

لقد قمنا بمحاولة أولى لفهم الغازات غير المثالية في الجزء (3.5)، باستخدام معادلة فاندرفال. وهي معادلة وصفية ناجحة؛ لأنها تنبأ بتحويل غاز كثيف إلى سائل، ولكنها ليست دقيقة تحليليًا، وارتباطها بالتفاعلات الجزيئية الأساسية ضعيف في أحسن الظروف. وعليه، هل يمكن أن نتقدم أكثر؟ وبصورة خاصة، هل يمكننا التنبؤ بتصرف غاز غير مثالي، باستخدام المبادئ الأساسية المتوافرة في أدوات الميكانيكا الإحصائية؟ الجواب لهذا السؤال هو نعم، ولكن ليس سهلاً. وفي محتوى هذا الكتاب على الأقل، فإن حسابات أساسية لمواصفات غاز غير مثالي تكون ممكنة فقط للكثافات المنخفضة، عندما تكون التفاعلات بين الجزيئات، لا تزال ضعيفة نسبيًا. وسنجرى مثل هذه الحسابات في هذا الجزء، ونصل في نهاية الأمر إلى تصحيح لقانون الغاز المثالي الذي ينطبق على حالة الكثافة المنخفضة. إن هذه الطريقة لن تساعد على فهمنا لتحويل الطور من الحالة الغازية إلى الحالة السائلة أو العكس. لكن النتائج، على الأقل، ستكون دقيقة في المدى الذي تصلح فيه. باختصار، فإننا نستبدل بالتعميمات الدقيقة والوضوح.

دالة التجزيء The Partition Function

نبدأ، على نحو ما نفعّل دائمًا، بكتابة دالة التجزيء. وتطبيقًا لوجهات نظر الجزء (5.2)، والسؤال (5.1.6)، نصف حالة جزيء ما بدلالة متجهات موقعه وزخمه. وعليه، فإن دالة التجزيء لجزيء منفرد يعبر عنها على النحو الآتي:

$$(1.8) \quad Z_1 = \frac{1}{h^3} \int d^3r d^3p e^{-\beta E}$$

حيث إن إشارة التكامل الواحدة تمثل ستة تكاملات: ثلاثة على مركبات الموقع (d^3r) والثلاثة الأخرى على مركبات الزخم (d^3p). وتنضمن منطقة التكامل جميع متجهات الزخم، وهي فقط متجهات الموقع في داخل صندوق حجمه V . أما المعامل $1/h^3$ فقد استخدم ليعطي عددًا لا وحدة له، وهو عدد دوال الأمواج المستقرة. وللتبسيط، فقد حذفنا أي مجموع يمثل الحالات الداخلية (لحالات الحركة الدورانية) للجزيء. وتشبه المعادلة (1.8)، لجزيء منفرد دون درجات حرية داخلية، ما استخدم في الجزء (7.6) لغاز مثالي، وعلى نحو ما هو مبين في السؤال (5.1.6). إن دالة التجزيء لغاز مكون من عدد N من الجزيئات المتماثلة سهل، ولكن منظره مخيف نوعًا ما:

$$(2.8) \quad Z = \frac{1}{N!} \frac{1}{h^{3N}} \int d^3r_1 \dots d^3r_N d^3p_1 \dots d^3p_N e^{-\beta U}$$

ويوجد الآن ($6N$) من التكاملات على مركبات الموقع ومركبات الزخم للجزيئات جميعها، وهناك أيضًا N معملًا من ($1/h^3$) معملًا آخر $\frac{1}{N!}$ ، ولنأخذ في الحسبان عدم التمايز للجسيمات المتماثلة. ويحتوي معمل بولتزمان الطاقة الكلية، U ، للنظام الكلي.

ولو كان هذا غازًا مثاليًا، فإن الطاقة الكلية، U ، ستكون فقط جمع حدود الطاقة الحركية.

$$(3.8) \quad U_{\text{kin}} = \frac{|\vec{p}_1|^2}{2m} + \frac{|\vec{p}_2|^2}{2m} + \dots + \frac{|\vec{p}_N|^2}{2m}$$

ولغاز غير مثالي، توجد طاقة وضع، إضافة إلى الطاقة الحركية، ناتجة عن التفاعلات بين الجزيئات. وإذا رمزنا إلى طاقة الوضع الكلية بالرمز U_{pot} ، فيمكن كتابة دالة التجزيء على النحو الآتي:

$$(4.8) \quad Z = \frac{1}{N!} \frac{1}{h^{3N}} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N d^3 p_1 \cdots d^3 p_N e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \bar{p}_i^2} \cdots e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \bar{p}_i^2 / 2m} e^{-\beta U_{pot}}$$

من السهل إجراء التكاملات $\int d^3 p_i$ على مركبات الزخم، نظرًا إلى أن طاقة الوضع تعتمد فقط على مواقع الجزيئات، وليس على زخمها، فإن كل زخم \bar{p}_i يظهر فقط في طاقة الحركة، وعليه يظهر فقط في معامل بولتزمان للطاقة الحركية $e^{-\beta \sum_{i=1}^N \frac{1}{2} m \bar{p}_i^2 / 2m}$. إن التكامل على هذا الزخم يمكن إجراؤه تمامًا، كما لو كان النظام غازًا مثاليًا، ويعطي النتيجة نفسها.

$$(5.8) \quad \int d^3 p_i e^{-\beta \frac{1}{2} m \bar{p}_i^2 / 2m} = (\sqrt{2\pi m k T})^3$$

وبتجميع N من هذه العوامل نحصل على دالة التجزيء:

$$(6.8) \quad Z = \frac{1}{N!} \left(\frac{\sqrt{2\pi m k T}}{h} \right)^{3N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N e^{-\beta U_{pot}}$$

$$= Z_{ideal} \cdot \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N e^{-\beta U_{pot}}$$

حيث Z_{ideal} دالة التجزيء لغاز مثالي (المعادلة (85.6))، وعليه، فإن مهمتنا أصبحت حساب التكاملات في بقية الصيغة.

$$(7.8) \quad Z_c = \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N e^{-\beta U_{pot}}$$

ويسمى التكامل في المعادلة (7.8) تكامل الوضعية؛ لأنه يتضمن إجراء تكامل على الأوضاع جميعها، أو مواقع الجزيئات.

نشر التجمعات The Cluster Expansion

حتى نكتب تكامل الوضعية بطريقة أكثر وضوحًا، نفترض أن طاقة الوضع للغاز تكتب على صورة تجميع طاقات الوضع الناتجة عن التفاعلات بين أزواج من الجزيئات.

$$(8.8) \quad U_{pot} = u_{12} + u_{13} + \cdots + u_{1N} + u_{23} + \cdots + u_{N-1,N} = \sum_{pairs} u_{ij}$$

ويمثل كل حد، u_{ij} ، طاقة الوضع الناتجة عن تفاعل الجزيء i مع الجزيء j ، ونفترض أن هذا التفاعل يعتمد على المسافة بين هذين الجزيئين، $|\vec{r}_i - \vec{r}_j|$ ، ويُعد هذا تبسيطًا مهمًا. لقد أهملت أي إمكانية لاعتماد طاقة الوضع على ترتيب الجزيئات، وأهملت حقيقة، أنه عند اقتراب جزيئين من بعضهما، فإن ذلك سيشوه كلا منهما، مغيرًا بذلك تفاعل أي واحد منهما مع جزيء ثالث، ومع ذلك، فإن هذه التبسيطات كلها لا تسهل

شكل تكامل الوضعية الذي يصبح على النحو الآتي:

$$(9.8) \quad Z_c = \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \prod_{pairs} e^{-\beta u_{ij}}$$

حيث الرمز \prod حاصل ضرب لجميع الأزواج i, j المختلفة.

أولاً وأخيراً، فإننا نحتاج إلى افتراض صيغة صريحة للدالة u_{ij} . وكل ما نريد أن نعرفه عنها، حالياً، أنها تؤول الى الصفر عندما تصبح المسافة بين الجزيئين، i, j كبيرة. عملياً، فإن جميع أزواج الجزيئات جميعها ستكون بعيدة عن بعضها، خصوصاً في الغازات قليلة الكثافة، حيث تكون $u_{ij} \ll kT$. وعليه، فإن معامل بولتزمان يكون قريباً للغاية من 1. أخذين ذلك في الحسبان، فإن الخطوة اللاحقة هي فصل اتحراف كل من معاملات بولتزمان عن 1. بكتابتته على النحو الآتي:

$$(10.8) \quad e^{-\beta u_{ij}} = 1 + f_{ij}$$

وأنعلاقة الأخيرة تعرف بكمية جديدة هي f_{ij} ، التي يطلق عليها اسم دالة f لماير. وعندها يصبح حاصل ضرب جميع عوامل بولتزمان على النحو الآتي:

$$(11.8) \quad \prod_{pairs} e^{-\beta u_{ij}} = \prod_{pairs} (1 + f_{ij}) \\ = (1 + f_{12})(1 + f_{13}) \cdots (1 + f_{1N})(1 + f_{23}) \cdots (1 + f_{N-1,N})$$

وإذا تصورنا ضرب هذه العوامل جميعها، فإن الحد الأول سيكون 1، وبعدها سيكون عندنا مجموعة من الحدود، يحتوي كل منها على f واحدة، ثم مجموعة أخرى تحتوي اثنتين من دوال f وهكذا.

$$(12.8) \quad \prod_{pairs} e^{-\beta u_{ij}} = 1 + \sum_{pairs} f_{ij} + \sum_{distinct\ pairs} f_{ij} f_{kl} + \cdots$$

وبتعويض هذه الصيغة في تكامل الوضعية، نحصل على ما يأتي:

$$(13.8) \quad Z_c = \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N \left(1 + \sum_{pairs} f_{ij} + \sum_{distinct\ pairs} f_{ij} f_{kl} + \cdots \right)$$

ونأمل دائماً، في أن تصبح الحدود أقل أهمية، كلما احتوت على عدد أكبر من دوال f ، حيث نتمكن من إجراء الحسابات بأخذ الحد الأول، والحددين الأولين ونهمل بقية الحدود. ومن السهل جداً حساب الحد الأول الذي لا يحتوي على الدالة f . وإن كل عنصر $d^3 r$ عند تكامله يعطي معاملاً V لحجم الصندوق.

$$(14.8) \quad \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N (1) = 1$$

وفي الحدود جميعها التي تتضمن الدالة f مرة واحدة، فإن التكاملات جميعها باستثناء تكاملين اثنين، تعطي المعامل V ، فعلى سبيل المثال:

$$(15.8) \quad \frac{1}{V^N} \int d^3 r_1 \cdots d^3 r_N f_{12} = \frac{1}{V^N} V^{N-2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 f_{12} \\ = \frac{1}{V^2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 f_{12}$$

نظرًا إلى أن f_{12} تعتمد فقط على \vec{r}_1 و \vec{r}_2 ، ولأنه ليس مهمًا أيضًا أي الجزيئين قد سُمي جزيء 1 وأيهما سُمي جزيء 2، فإن كل حد يحتوي على واحدة من الدوال f يساوي تمامًا الحد الذي أجري عليه التكامل، وعليه فإن المجموع على هذه الحدود كلها يساوي تلك النتيجة مضروبة في عدد الأزواج المختلفة $N(N-1)/2$.

$$(16.8) \quad \frac{1}{V^N} \int d^3r_1 \dots d^3r_N \left(\sum_{\text{pairs}} f_{ij} \right) = \frac{1}{2} \frac{N(N-1)}{V^2} \int d^3r_1 d^3r_2 f_{12}$$

قبل الاستمرار، نعرض صورة (رسمًا) لهذه الصيغة، التي تعطي طريقة فيزيائية للتعبير عنها. تتكون الصورة من نقطتين (زوج من النقاط) تمثلان الجزيء 1، والجزيء 2 موصولين بخط يمثل التفاعل بينهما.

$$(17.8) \quad \text{---} = \frac{1}{2} \frac{N(N-1)}{V^2} \int d^3r_1 d^3r_2 f_{12}$$

ولتحويل الصورة إلى صيغة نستخدم القوانين الآتية:

1. أعطِ النقاط أرقامًا ابتداءً من الجزيء 1، ولكل نقطة i ، واكتب الصيغة f_{ij} ، ثم اضرب في العدد N للنقطة الأولى، و $N-1$ للنقطة الثانية، و $(N-2)$ للنقطة الثالثة، وهكذا.
2. اكتب معامل f_{ij} للخط الواصل بين النقطتين i و j .

3. اقسم على معامل تماثل الشكل، وهو عدد الطرق لترقيم النقاط دون أن تغير حاصل ضرب الدوال f (أو، معامل التماثل يساوي تغييرات النقاط التي تترك الشكل دون تغيير).

وإذا استخدمنا هذه القوانين، وطبقناها على الشكل في المعادلة (17.8)، فإننا نحصل على الصيغة الموجودة على الطرف الأيمن من المعادلة. فمثلًا معامل التماثل هنا يساوي 2 نظرًا إلى أن $f_{12} = f_{21}$. فإن هذا الشكل فيزيائيًا يمثل الوضع الذي يوجد فيه جزيئان اثنان متفاعلان فقط.

والآن، لنتعامل مع تكامل الوضعية في المعادلة (13.8) بدالتين من دوال f . إن كل حد من هذه الحدود يحتوي زوجين من الجزيئات، ويمكن لهذين الزوجين أن يشتركا في جزيء واحد، أو ألا يشتركا إطلاقًا. وفي الحد الذي يتشارك فيه الزوجان بجزيء واحد، فإن التكاملات جميعها باستثناء ثلاثة منها تعطي المعامل V . فإن عدد هذه الحدود يساوي $N(N-1)(N-2)/2$ ، وعليه، فإن مجموع هذه الحدود يساوي الرسم الثاني:

$$(18.8) \quad \text{---} \text{---} = \frac{1}{2} \frac{N(N-1)(N-2)}{V^3} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 f_{12} f_{23}$$

ويمثل هذا الرسم وضعًا يكون فيه جزيء واحد متفاعل في الوقت نفسه مع الجزيئين الآخرين. وفي الحد الذي لا يتشارك فيه الزوجان تبقى أربعة تكاملات، ويكون عدد الحدود تلك $8(N-1)(N-2)(N-3)$ ، وعليه، فإن مجموع هذه الحدود يُمثل بالشكل الآتي:

$$(19.8) \quad \text{---} \text{---} \text{---} = \frac{1}{8} \frac{N(N-1)(N-2)(N-3)}{V^4} \int d^3r_1 d^3r_2 d^3r_3 d^3r_4 f_{12} f_{34}$$

الشكل الآن، يمثل تفاعلين متزامنين بين أزواج من الجزيئات. إن القوانين السابقة لأي من هذين الرسمين

تعطي الصيغ الصحيحة بدقة عالية. ومن الآن، فمن المحتمل أن تكامل الوضع الكلي يمكن كتابته على صورة مجموع من هذه الصور.

$$Z_c = 1 + \text{I} + \text{II} + (\text{III}) + \text{IV} + \text{V} + \text{VI} + \text{VII} + \text{VIII} + \dots \quad (20.8)$$

إن كل صورة محتملة تحصل مرة واحدة في هذا المجموع، مع وجوب أن تتصل كل نقطة على الأقل بنقطة أخرى، وأن أي زوج من النقاط لا يمكن توصيله أكثر من مرة واحدة. ولن نحاول هنا إثبات أن المعامل التوافقي يعطي الجواب الصحيح دائماً ولجميع الحالات. لكنها دائماً تعطي الجواب الصحيح. إن هذا التمثيل لتكامل الوضعية مثال على سلسلة القلقلة الصورية. فالحد الأول، 1، يمثل الحالة المثالية لغاز مكون من جزيئات غير متفاعلة. في حين أن الحدود الأخرى الممثلة بالصور، تبين التفاعلات التي تقلل النظام بعيداً عن الحالة المثالية.

وتوقع أن تكون الأشكال الأسهل أكثر أهمية من الأشكال الأكثر تعقيداً، على الأقل، للغازات ذات الكثافات المنخفضة، حيث إن التفاعلات المتزامنة لعدد كبير من الجزيئات حالة نادرة. وعلى الرغم من عدم الحاجة بصورة عامة إلى حساب الأشكال المعقدة، لكنها لا تزال توفر طريقة لإظهار التفاعلات التي تتم بين عدد اختياري من الجزيئات.

لكن حتى للغازات قليلة الكثافة، فلن يكفي الاحتفاظ فقط بأول حدين في التمثيل الشكلي لنشر Z_c ، وسنرى مباشرة أن أبسط الأشكال (بنقطتين فقط) تعطي نتيجة أعلى كثيراً من 1، وعليه فإن المتوالية الصغيرة الآتية:

$$1 + \text{I} + (\text{II}) + (\text{III}) + \dots \quad (21.8)$$

لا تتوقف عند قيمة معينة إلا بعد أخذ عدد كبير من الحدود في الحسبان، وعندما يصبح معامل التماثل كبيراً جداً. ويحدث هذا فيزيائياً لأن التفاعلات المتزامنة لعدد كبير من الأزواج المعزولة يصبح شائعاً عندما يكون عدد الجزيئات N كبيراً. لكن لحسن الحظ، فإنه يمكن تسهيل الجمع، فمثلاً على الأقل نستطيع أن نساوي $N = N - 1 = N - 2 = N - 3$ وهكذا. ونظراً إلى أن معامل التماثل لشكل متقطع يحتوي على عدد n ، من الأشكال الصغيرة المتماثلة يساوي $n!$ ، وهو موجود في المقام، فإن هذه السلسلة ببساطة تصبح على النحو الآتي:

$$1 + \text{I} + \frac{1}{2}(\text{II})^2 + \frac{1}{3!}(\text{III})^3 + \dots = \exp(\text{I}) \quad (22.8)$$

وبطريقة أخرى، فإن الأشكال المنفصلة تتجمع كلها في دالة أسية للشكل المتصل. لكن ليس هذا كل شيء، فعلى المستوى الآتي من التقريب، عندما تحتفظ بالحدود الأقل بالمعامل N ، فإن السلسلة تحتوي الشكل المتصل (المعطى بالمعادلة (18.8)). (انظر السؤال 7.8). هناك اختصارات أخرى مماثلة تحدث بين الأشكال الأكثر تعقيداً، وكنتيجه نهائية يمكن كتابة Z_c على صورة دالة أسية لمجموع الأشكال المتصلة فقط، التي تبقى متصلة حتى لو أزيلت نقطة واحدة:

$$Z_c = \exp \left(\text{I} + \text{II} + \text{III} + \text{IV} + \text{V} + \dots \right) \quad (23.8)$$

وهذه الصيغة ليست صيغة تامة، لكن الحدود التي أسقطت تؤول الى الصفر، عندما تؤول $x \rightarrow N$ ، في حين تبقى $(\frac{N}{V})$ ثابتة. كذلك عند هذه المرحلة يمكن وضع $N = N - 1 = N - 2 = \dots$ وهكذا في الحسابات اللاحقة جميعها. ولسوء الحظ، فإن إثبات هذه الصيغة يقع خارج نطاق هذا الكتاب.

إن كل شكل في المعادلة (23.8) يسمى تجمعاً؛ لأنها تمثل تجمعاً من الجزيئات المتفاعلة في الوقت نفسه. وتسمى الصيغة نفسها نشر التجمعات لتكامل الوضعية. إن نشر التجمعات سلسلة ذات تصرف جيد حيث إنه يكون لغاز قليل الكثافة، فإن أي شكل للتجمع بنقاط أكثر يكون أقل من شكل التجمع بنقاط أقل.

والآن لنضع الأجزاء مع بعضها. لتذكر من المعادلة (6.8)، أن دالة التجزيء الكلية لغاز تساوي تكامل الوضعية مضروباً في دالة التجزيء لغاز مثالي:

$$Z = Z_{ideal} \cdot Z_c \quad (24.8)$$

ولحساب الضغط، لا بد من معرفة طاقة هلمهولتز الحرة التي يعبر عنها على النحو الآتي:

$$F = -kT \ln Z = -kT \ln Z_{ideal} - kT \ln Z_c \quad (25.8)$$

لقد تم حساب Z_{ideal} في الجزء (7.6)، وبتعويض تلك النتيجة، ونشر التجمع للدالة Z_c ، نحصل على:

$$F = -NkT \ln \left(\frac{V}{NvQ} \right) - kT \left(\text{●} + \text{▲} + \text{■} + \dots \right) \quad (26.8)$$

وعليه، فإن الضغط يساوي:

$$P = - \left(\frac{\partial F}{\partial V} \right)_{N,T} = \frac{NkT}{V} + kT \frac{\partial}{\partial V} \left(\text{●} + \text{▲} + \text{■} + \dots \right) \quad (27.8)$$

لذا، إذا تمكنا من حساب عدد من أشكال التجمعات بصورة واضحة، نكون قد أدخلنا تحسينات على قانون الغاز المثالي.

السؤال 1.8: اكتب الصيغة الملازمة لكل من الأشكال المبينة في المعادلة (20.8)، بدلالة دوال f ، وفسر لماذا يعطي معامل التماثل المعامل الكلي الصحيح.

السؤال 2.8: ارسم الأشكال المتصلة أو غير المتصلة جميعها، التي تمثل الحدود في تكامل الوضع المكونة من أربعة عوامل من f . ستجد 11 شكلاً على صورة عدد كلي، خمسة منها متصلة.

السؤال 3.8: محتفظاً فقط بأول شكلين في المعادلة (23.8) ومقرباً ... $N \approx N - 1 \approx N - 2 \approx N - 3$ ، انشر الدالة الأسية على صورة سلسلة قوى لغاية القوة الثالثة، ثم اضرب الحدود جميعها، وبيّن أن المعاملات العددية تعطي بدقة معامل التماثل الصحيح للأشكال المنفصلة.

السؤال 4.8: ارسم الأشكال جميعها التي تحتوي على أربع نقاط. (توجد ستة أشكال على صورة عدد كلي). كن حذراً من تجنب رسم شكلين يظهران مختلفين، وهما في الواقع الشكل نفسه. أي هذه الأشكال يبقى متصلاً عند إزاحة نقطة واحدة؟

المعامل الحدي الثاني The Second Virial Coefficient

لنتعامل الآن مع أسهل الأشكال ذوات النقطتين:

$$(28.8) \quad \mathbb{I} = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V^2} \int d^3 r_1 d^3 r_2 f_{12}$$

ونظراً إلى كون الدالة f تعتمد على المسافة بين الجزيئين، نعرف $\vec{r} \equiv \vec{r}_2 - \vec{r}_1$ ، ونستبدل المتغيرات في التكامل الثاني من \vec{r}_2 إلى \vec{r} ، ونحصل بذلك على الآتي:

$$(29.8) \quad \mathbb{I} = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V^2} \int d^3 r_1 \left(\int d^3 r f(r) \right)$$

حيث $f(r)$ تساوي:

$$(30.8) \quad f(r) = e^{-\beta u(r)} - 1$$

$u(r)$ ، طاقة الوضع الناتجة عن التفاعل بين أي زوج من الجزيئات، وهي دالة من المسافة بين مركزي جزيئين. إن إجراء التكامل على \vec{r} يحتاج إلى بعض الجهد، ولكن يمكن قول الآتي عن هذا التكامل: النتيجة سوف تكون على صورة صيغة ذاتية لا تعتمد على \vec{r} أو V ، وهذا لأن الدالة $f(r)$ تؤول إلى الصفر، عندما تكون r أكبر بمرات عدة فقط من حجم الجزيء. إن احتمال أن تكون r_1 على بعد مثل هذه المسافة من جدار الصندوق مهملة. وعليه، مهما كانت قيمة التكامل، فإن التكامل المتبقي على \vec{r}_1 يعطي معاملاً يساوي V ، فيصبح التكامل على النحو الآتي.

$$(31.8) \quad \mathbb{I} = \frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int d^3 r f(r)$$

وبتعويض هذه النتيجة في المعادلة (27.8)، نحصل على الضغط على النحو الآتي:

$$(32.8) \quad \begin{aligned} P &= \frac{NkT}{V} + kT \frac{\partial}{\partial V} \left(\frac{1}{2} \frac{N^2}{V} \int d^3 r f_{12}(r) \right) + \dots \\ &= \frac{NkT}{V} - kT \cdot \frac{1}{2} \frac{N^2}{V^2} \int d^3 r f(r) + \dots \\ &= \frac{NkT}{V} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{N}{V} \int d^3 r f(r) + \dots \right) \end{aligned}$$

ومن المعتاد كتابة هذه السلسلة على صورة نشر العوامل الحدية الذي تم التطرق إليه في السؤال (17.1)، وعليه يصبح الضغط على النحو الآتي:

$$(33.8) \quad P = \frac{NkT}{V} \left(1 + \frac{B(T)}{(V/N)} + \frac{C(T)}{(V/N)^2} + \dots \right)$$

الآن، أصبح في الإمكان حساب المعامل الحدي الثاني، $B(T)$ ، على النحو الآتي:

$$(34.8) \quad B(T) = -\frac{1}{2} \int d^3 r f(r)$$

استخدم المحاور الكروية لحساب التكامل الثلاثي في المعادلة السابقة، ويكون عنصر الحجم معبراً عنه بالعلاقة الآتية:

$$(35.8) \quad d^3 r = (dr)(r d\theta)(r \sin\theta d\phi)$$

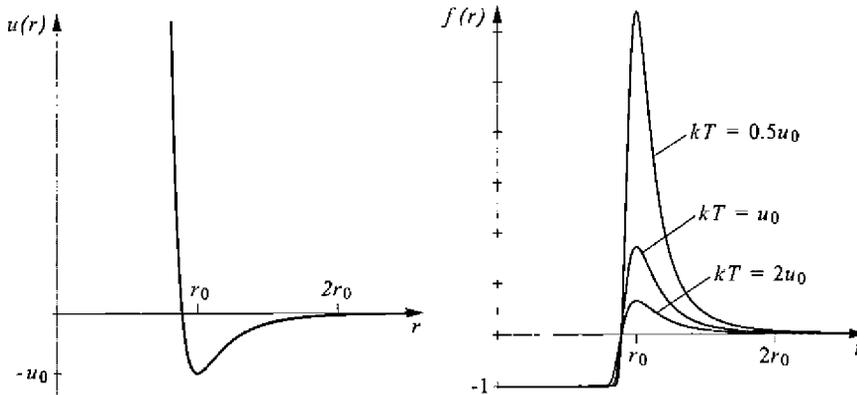
ونظراً إلى أن الدالة $f(r)$ لا تعتمد على الزوايا θ و ϕ ، فإن التكامل على الزوايا يعطي القيمة 4π ، مساحة كرة نصف قطرها الوحدة، وعليه يصبح المعامل $B(T)$ على النحو الآتي:

$$(36.8) \quad B(T) = -2\pi \int_0^\infty r^2 f(r) dr = -2\pi \int_0^\infty r^2 (e^{-\beta u(r)} - 1) dr.$$

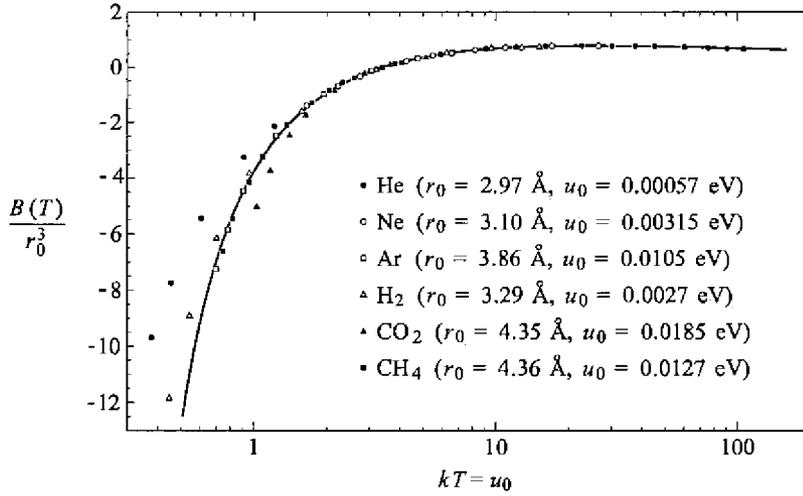
وهذه النتيجة، هي أكثر ما يمكن الوصول إليه دون وجود صيغة واضحة لطاقة الوضع بين الجزيئات، $u(r)$. ولوضع نموذج واقعي لطاقة الوضع بين الجزيئات، نبحت عن دالة تعطي تجاذباً ضعيفاً بين الجزيئات عند مسافات بعيدة عن بعضها، وتعطي قوة تنافرية كبيرة عند مسافات صغيرة. (على نحو ما شُرح في الجزء 3.5). وللجزيئات التي لا تمتلك عزوفاً كهربائية دائمة، فإن قوى المسافات البعيدة تنشأ من التذبذبات الذاتية للعزوم الكهربائية في أحد الجزيئات الذي ينتج عزوفاً كهربائياً، بحفز وتنشيط الجزيء الآخر، ومن ثم تجذبه ويمكن أن نبين أن هذه القوة تتناسب مع $1/r^7$ ، وعليه فإن طاقة الوضع الملازمة لهذه القوة تتناسب مع $1/r^6$. إن الصيغة التي تصف الجزء التنافري فيه، ليست حرجة، وقد وجد أن حدّاً يتناسب مع $1/r^{12}$ يفي بالغرض، ويستخدم كثيراً. إن مجموع هذين الحدين (التجاذبي والتنافري) يعطيان طاقة الوضع بين جزيئين. ويطلق على هذا الجهد اسم جهد ليونارد وجونز 6-12 الذي يعبر عنه بالعلاقة الآتية:

$$(37.8) \quad u(r) = u_0 \left[\left(\frac{r_0}{r} \right)^{12} - 2 \left(\frac{r_0}{r} \right)^6 \right]$$

ويبين الشكل (1.8) رسماً بيانياً لجهد ليونارد وجونز، ورسوماً لدوال f لماير الملازمة، عند ثلاث درجات حرارة مختلفة. ويمثل الثابت r_0 المسافة بين الجزيئين التي تكون عندها طاقة الوضع $u(r)$ أقل ما يمكن، ويساوي قطر الجزيء الواحد تقريباً، في حين أن الثابت u_0 يمثل أكبر عمق لبئر الجهد. وعند تعويض دالة جهد ليونارد وجونز في المعادلة (36.8) وحساب التكامل عددياً، عند درجات حرارة مختلفة، نحصل على قيم المعامل الحدي الثاني بوصفه دالة من درجة الحرارة الممثلة بالمنحنى المتصل في الشكل (2.8).



الشكل 1.8: دالة جهد ليونارد وجونز بين الجزيئات (يساراً) ويبين منطقة تنافرية قوية عند مسافات صغيرة، ومنطقة تجاذبية ضعيفة عند مسافات كبيرة، وعلى الطرف الأيمن دوال f لماير عند ثلاث درجات حرارة مختلفة.



الشكل 8.2: قياسات للمعامل الحدي الثاني لغازات مختارة مقارنة بما تنبئ به المعادلة (36.8)، عند أخذ $u(r)$ عبارة عن جهد ليونارد وجونز. ويلاحظ أن المحور الأفقي لوغاريتمي. لقد اختير الثابتان r_0 و u_0 لكل غاز على حدة، للحصول على أفضل اتفاق بين النتائج العملية والنظرية، وإن الاتفاق الرديء لغاز ثاني أكسيد الكربون ناتج عن عدم التماثل في شكل الجزيء، في حين أنه في حالة الهيدروجين والهيليوم، فإن الفارق عند درجات حرارة منخفضة ناتج عن التأثيرات الكمية.

وعند درجات الحرارة المنخفضة، فإن تكامل الدالة f يُحدد إلى حد كبير بالارتفاع الكبير الموجب في تلك الدالة عند r_0 ، وهذا يعني أنه يحدده بئر الجهد التجاذبي. إن قيمة موجبة لمتوسط الدالة f يؤدي إلى قيمة سالبة للمعامل الحدي الثاني، مشيرًا إلى أن ضغطه أقل من الضغط في الغاز المثالي. لكن عند درجات حرارة مرتفعة، فإن جهد البئر السالب لا يؤثر بالحدة نفسها، كما هو الحال عند درجات الحرارة المنخفضة في f ؛ لذا فإن التكامل يحدده الجزء السالب من الدالة f ، الناتج عن تفاعلات المدى القصير التنافرية. وعليه، فإن المعامل الحدي الثاني يكون موجبًا بدلًا من كونه سالبًا؛ لذا فالضغط هنا يكون أكبر من الضغط للغاز المثالي. أما عند درجات حرارة عالية جدًا، فإن هذا الأثر يقل إلى حد ما، بسبب قدرة الجزيئات ذات الطاقات العالية للاختراق جزيئيًا للمنطقة التنافرية.

ويبين الشكل (2.8) أيضًا، القيم التجريبية للمعامل $B(T)$ لمجموعة من الغازات، وقد رسمت بعد اختيار r_0 و u_0 لكل غاز على حدة، للحصول على أفضل اتفاق مع المنحنى النظري. ولمعظم الغازات البسيطة، فإن شكل المعامل $B(T)$ الناتج عن دالة جهد ليونارد وجونز يتفق جيدًا مع النتائج العملية (للغازات ذات الأشكال غير المتماثلة بقوة أو لغازات ذات عزوم كهربائية دائمة، فإن دوال أخرى للجهد قد تكون ملائمة أكثر من جهد ليونارد وجونز، في حين أن للغازات الخفيفة كالهيدروجين والهيليوم، فإن التأثيرات الكمية تصبح مهمة

عند درجات الحرارة المنخفضة⁽⁸¹⁾. إن هذا الاتفاق مع النتائج العملية يشير إلى أن دالة جهد ليونارد وجومر تكون نموذجاً معقولاً لوصف التفاعلات بين الجزيئات، وتعطي أيضاً القيم المختارة μ_0 و τ_0 لإحداث الاتفاق مع النتائج العملية معلومات عن حجوم واستقطابية الجزيئات. وعلى نحو ما هو الحال دائماً، فإن الميكانيك الإحصائي يعمل في اتجاهين، فمن فهمنا النظري للفيزياء المجهرية نتوصل إلى تنبؤات عن تصرف أنظمة مكونة من أعداد كبيرة من الجزيئات، ومن الجهة الثانية، فمن القياسات لصفات المادة بحجم كبير، نتمكن من التنبؤ بمعلومات كثيرة عن الجزيئات نفسها.

ومن حيث المبدأ، فإننا نستطيع الاستمرار في حساب المعامل الثالث، والمعاملات الحدية الأعلى للغازات ذات الكثافات المنخفضة باستخدام نشر التجمعات. لكننا عملياً سنواجه مشكلتين أساسيتين في ذلك، أولاًهما: أن حساب الأشكال المتبقية في المعادلة (27.8) صعب. وثانيتهما، وهي الأسوأ، فعند وجود تجمع من ثلاثة أو أكثر من الجزيئات المتفاعلة، فإنه ليس صحيحاً (في كثير من الحالات) كتابة طاقة الوضع بوصفها مجموعاً لتفاعلات أزواج من الجزيئات، على نحو ما فعلنا في المعادلة (8.8). لكن يمكن التغلب على هاتين المشكلتين، أما الحسابات الملائمة للمعامل الثالث فلا تقع في نطاق هذا الكتاب⁽⁸²⁾.

السؤال 5.8: باستبدال المتغيرات على نحو ما تم في الكتاب، عبّر عن الشكل في المعادلة (18.8) بدلالة التكامل نفسه الذي استخدم في المعادلة (31.8). اعمل الشيء نفسه للشكلين الأخيرين في السطر الأول من المعادلة (20.8). ما الأشكال التي لا يمكن كتابتها بدلالة هذا التكامل الأساسي؟

السؤال 6.8: بالإمكان تقدير حجم أي شكل من الأشكال من معرفة أن الدالة $f(r)$ هي بحدود I لغاية مسافة تساوي قطر الجزيء، وتساوي صفرًا بعد تلك المسافة، وعليه، فإن التكامل الثلاثي على الدوال f سيعطي بوجه عام نتائج من رتبة الحجم نفسه، V ، للجزيء. استناداً إلى ذلك، قدر حجم الأشكال المبيّنة جميعها تقديراً صريحاً في المعادلة (20.8)، وبيّن سبب كتابة هذه السلسلة على صورة دالة أسية.

السؤال 7.8: بيّن، في حالة عدم إجراء تقريبات كثيرة، أن السلسلة الأسية في المعادلة (22.8) تتضمن الأشكال ذات النقاط الثلاث في المعادلة (18.8). علماً بأنه ستبقى حدود أخرى، بيّن أن هذه الحدود المتبقية تؤول إلى الصفر عند النهاية الديناميكية الحرارية.

السؤال 8.8: بيّن أن المعامل الحدي n يعتمد على الأشكال ذات العدد n من النقاط في المعادلة (23.8). واكتب المعامل الثالث $C(T)$ بدلالة تكامل على الدوال f . لماذا يكون إجراء هذا التكامل صعباً؟

(81) على نحو ما هو مبين في السؤال 75.7، فإن مساهمة الإحصاء الكمي للمعامل $B(T)$ يجب أن تكون سالبة لغاز من البوزونات كالهيدروجين أو الهيليوم. ومع ذلك، فهناك تأثير كمي آخر تم يؤخذ في الحسبان في السؤال. إن موجة ديبرولي لأحد الجزيئات لا يمكنها اختراق الحجم الفيزيائي لجزيء آخر؛ لذا عندما يصبح متوسط طول موجة ديبرولي (ℓ_Q) أكبر من القطر الفيزيائي (r_0) يكون التناثر أكثر من الحالة الكلاسيكية. ويصبح أثر الإحصاء الكمي مهماً فقط عند درجات حرارة منخفضة، عندما تكون (ℓ_Q) قريبة من البعد بين الجزيئات، إن كلاً من الهيدروجين والهيليوم يتحولان إلى سائل قبل الوصول إلى درجات الحرارة تلك. ولمناقشة كاملة للعوامل الحدية وفيها التأثيرات الكمية انظر في:

Joseph O. Hirschfelder, Charles F. Curtiss and R. Byron Bird, *Molecular Theory of gases and liquids* (Wiley, New York, 1954).

(82) لمناقشة حساب المعامل الحدي الثالث والمقارنة بين النظرية والتجربة انظر في مقالة Reichl (1998).

السؤال 9.8: بين أن جهد ليونارد وجونز يصل قيمته الدنيا عند $r = r_0$ ، وأن قيمة الجهد عند تلك النقطة تساوي (u_0) . وما قيمة r التي يكون جهد ليونارد وجونز عندها يساوي صفراً؟

السؤال 10.8: احسب، ومن ثم ارسم المعامل المتغير الثاني باستخدام جهاز حاسوب لغاز مكون من جزيئات متفاعلة بحسب جهد ليونارد وجونز لقيم u_0/kT واقعة في المدى I إلى 7. وعلى الرسم نفسه، ارسم النتائج العملية، المعطاة في السؤال 17.1، لغاز النتروجين، واختر قيماً لكل من r_0 و kT/u_0 التي تعطي أفضل اتفاق.

السؤال 11.8: افترض أن غازاً من «كرات صلبة» لا تتفاعل إطلاقاً إلا عندما يصبح البعد بينها أقل من r_0 ، عند ذلك، فإن طاقة التفاعل بينها تكون لا نهائية. ارسم دوال f لماير لهذا الغاز، ثم احسب المعامل المتغير الثاني، وناقش نتائجك باختصار.

السؤال 12.8: افترض أن غازاً مكوناً من جزيئات ذات طاقة تفاعل $u(r)$ تؤول إلى ما لانهاية عند $r < r_0$ وسالبة عند $r > r_0$ وبقيمة دنيا $(-u_0)$. افترض أن $kT \gg u_0$ ، وعليه يمكن تقريب معامل بولتزمان عند $r > r_0$ باستخدام $e^{-x} \approx 1 - x$. بين، تحت هذه الشروط، أن المعامل الحدي الثاني $B(T)$ سيأخذ الشكل $B(T) = b - (a/kT)$ وهو الشكل نفسه الذي وجد لغاز فاندرفال، السؤال (17.1). أكتب ثوابت فاندرفال a و b بدلالة r_0 و $u(r)$ ، وناقش نتائجك باختصار.

السؤال 13.8: استخدم طريقة نشر التجمعات لكتابة الطاقة الكلية لغاز غير مثالي أحادي الذرة بدلالة مجموعة من الأشكال. ومحتفظاً فقط بالشكل الأول، بين أن الطاقة يعبر عنها تقريباً بالصيغة الآتية:

$$U \approx \frac{3}{2} NkT + \frac{N^2}{V} \cdot 2\pi \int_0^\infty r^2 u(r) e^{-\beta u(r)} dr$$

احسب التكامل بوصفه دالة من درجة الحرارة عددياً باستخدام جهاز حاسوب، لجهد ليونارد وجونز. ارسم الجزء المطلوب من حد التصحيح المعتمد على درجة الحرارة، وفسر شكل المنحنى فيزيائياً. ثم ناقش التصحيح على السعة الحرارية عند حجم ثابت، واحسب هذا التصحيح عددياً لغاز الأرجون، عند درجة حرارة الغرفة وتحت ضغط جوي.

السؤال 14.8: لقد تم استخدام طريقة نشر التجمعات، في هذا الجزء من الكتاب، لغاز مكون من عدد ثابت من الجسيمات باستخدام الصيغة الكانونية التي نوقشت في الوحدة السادسة، لكن الطريقة الأفضل هي استخدام «الصيغة الكانونية العظمى» التي تعرضنا لها في الوحدة السابعة، حيث يسمح للنظام بتبادل الجسيمات مع مستودع كبير.

(أ) اكتب صيغة لدالة التجزيء العظمى Z لغاز ذي تفاعل ضعيف، في حالة اتزان حراري وانتشاري مع مستودع عند درجة حرارة ثابتة T وجهد كيميائي μ . عبّر عن Z بوصفه مجموعاً على جميع أعداد الجسيمات المحتملة، N . كل حد يحتوي على دالة التجزيء العادية $Z(N)$.

(ب) مستخدماً المعادلة (6.8) والمعادلة (20.8) عبّر عن $Z(N)$ بوصفها مجموعاً من الأشكال، ثم أجرِ الجمع على N شكلاً بعد شكل. وعبّر عن النتيجة بوصفها مجموعاً من الأشكال المشابهة، لكن بقانون رقم I جديد. الذي يلازم الصيغة $(\lambda/v_0) \int d^3r_i$ مع كل نقطة، حيث $\lambda = e^{\beta\mu}$. الآن بعد التعامل مع المعاملات الصعبة..... $(N-1)(N-2)$ تجد أن مجموع الأشكال جميعها يترتب على صورة نموذج أسّي ليعطي الصيغة الآتية:

$$Z = \exp\left(\frac{\lambda v}{u_0} + \text{●} + \text{▲} + \text{△} + \text{■} + \dots\right)$$

لاحظ أن الأس يحتوي الأشكال المتصلة جميعها، وفيها الأشكال التي يمكن فصلها بإزاحة خط واحد. (ج) مستخدمًا صفات دالة التجزئ العظمى (انظر السؤال 7.7) أوجد تعبيرًا شكليًا لمتوسط عدد الجسيمات وتعبيرًا شكليًا آخر للضغط لهذا الغاز.

(د) محتفظًا فقط بأول حد في كل مجموعة، عبّر عن $\bar{N}(\mu)$ و $P(\mu)$ بدلالة تكامل على دوال f لمباير. تخلص من μ للحصول على النتيجة نفسها للضغط (والمعامل الحدي الثاني)، على نحو ما اشتقت في الكتاب.

(هـ) من خلال إعداد الجزء (د) محتفظًا أيضًا بالأشكال ذات النقاط الثلاثية للحصول على المعامل المتغير الثالث بدلالة تكامل على دوال f . ستجد أن الأشكال على النحو Λ تختصر تاركة فقط الأشكال المثلثة لتسهم في $C(T)$.

2.8 نموذج آيسنج للفيرومغناطيسية

The Ising Model of a Ferromagnet

إن كل عزم مغناطيسي مجهري، في مادة بارامغناطيسية مثالية، يتجاوب فقط مع المجالات المغناطيسية الخارجية، إن وجدت، ولا يمتلك الرغبة الذاتية في الاصطفاف في اتجاه أو عكس اتجاه العزوم المجاورة مباشرة. لكن في المواد الحقيقية، فإن كل عزم مغناطيسي يتأثر بالعزوم المجاورة. وهناك دائمًا ميل للعزوم المغناطيسية المتجاورة إلى الاصطفاف في الاتجاه نفسه أو عكس الاتجاه. وفي بعض المواد، فإن هذا الميل ناتج عن القوى المغناطيسية العادية بين العزوم. وفي مثال أكثر دراماتيكية (الحديد مثلًا) فإن اصطفاف العزوم المتجاورة ناتج عن تأثيرات ميكانيكية كمية معقدة متضمنة مبدأ باولي للاستثناء. وفي كلتا الحالتين توجد مساهمة للطاقة، كبيرة أو صغيرة، اعتمادًا على الاصطفاف النسبي للعزوم المتجاورة.

عندما تصطف العزوم المغناطيسية المتجاورة في الاتجاه نفسه، حتى في حالة عدم وجود مجال خارجي، تسمى المادة الفيرومغناطيسية. (نسبة للحديد، أكثر الأمثلة شيوعًا). لكن عندما تصطف العزوم المتجاورة في اتجاهين متعاكسين تسمى عندها المادة الفيرومغناطيسية المعاكسة (FeO NiO C). وفي هذا الجزء سنتناول المواد الفيرومغناطيسية، علمًا بأن معظم الأفكار يمكن تطبيقها على المواد الفيرومغناطيسية المعاكسة.

ويظهر الترتيب طويل المدى الفيرومغناطيسي نفسه بمغنتطة محصلة غير صفرية. وعند رفع درجات الحرارة، فإن التذبذبات العشوائية للعزوم المغناطيسية تؤدي إلى تقليل المغنتطة الكلية للمادة. وتوجد لكل مادة مغناطيسية درجة حرارة حرجة، تسمى درجة حرارة كوري، عندها تصبح المغنتطة الكلية للمادة صفرًا، حقًا مع عدم وجود مجال خارجي. وعند درجات حرارة أعلى من درجة حرارة كوري تتحول المادة الفيرومغناطيسية إلى مادة بارامغناطيسية. ودرجة حرارة كوري للحديد تساوي 1043 K وهي أعلى بكثير من درجات حرارة كوري لمعظم المواد الفيرومغناطيسية الأخرى.

قد يلاحظ حتى عند درجات حرارة أقل من درجة حرارة كوري، أن قطعة من الحديد ممغنتطة. وسبب ذلك أن قطعة كبيرة من الحديد، عادة، تُقسّم نفسها إلى عدد من المناطق المجهرية في حجمها، لكنها لا تزال تحتوي مليارات من العزوم المغناطيسية الذرية. تكون المادة في كل منطقة من هذه المناطق ممغنتطة

لكن المجال المغناطيسي الناتج عن العزوم المغناطيسية في منطقة معينة، يكسب المناطق الأخرى المجاورة الميول إلى المغنطة في اتجاه معاكس لمغنطة المنطقة الأولى.

(ضع قضيبين مغناطيسيين جنباً إلى جنب، وسترى السبب). ونظراً إلى وجود عدد كبير جداً من المناطق في اتجاهات مغنطة موزعة عشوائياً في جميع الاتجاهات، لذا فإن المادة الكلية لا تظهر أي مغنطة. لكن إذا سخنت قطعة من الحديد بوجود مجال مغناطيسي خارجي، فإن المجال يتغلب على التفاعلات بين المناطق، ويؤدي إلى اصطفاف جميع العزوم المغناطيسية في الاتجاه نفسه. إن قطع المجال المغناطيسي بعد أن تبرد القطعة إلى درجة حرارة الغرفة، فإن التفاعل الفيرومغناطيسي عند درجة الحرارة تلك يحول دون أي إعادة مهمة لترتيب المناطق، وعليه نحصل على مغناطيس دائم.

وسنضع في هذا الجزئية نموذجاً لتصرف المادة الفيرومغناطيسية، أو بالأحرى، نموذجاً لتصرف منطقة في مادة فيرومغناطيسية. وسنأخذ في الحساب ميول العزوم المغناطيسية المتجاورة للاصطفاف في الاتجاه نفسه، لكن سنهمل أي تفاعلات طويلة المدى بين العزوم المغناطيسية. وللزيادة في تبسيط المشكلة نفترض أن للمادة محوراً مفضلاً للمغنطة، وأن كل عزم مغناطيسي ذري يصطف إما في اتجاه هذا المحور وإما معاكساً له⁽⁸³⁾.

إن هذا النموذج المبسط للمغناطيس يعرف باسم نموذج آيسنج، نسبة إلى أيرنست آيسنج الذي درسه في العام 1920⁽⁸⁴⁾. ويبين الشكل (3.8) حالة محتملة لنموذج آيسنج ببعدين مجزأ إلى 10×10 شبكة مربعة.

لنفترض أن العدد الكلي للعزوم المغناطيسية الذرية N ، وأن الحالة الحالية للعزم المغناطيسي رقم i . مع الاصطلاح بأن $s_i = 1$ عندما يتجه العزم المغناطيسي للأعلى، ويساوي (-1) عندما يشير العزم المغناطيسي للأسفل. إن طاقة التفاعل بين عزمين مغناطيسيين متجاورين تكون $(-ε)$ عندما يكون العزمان متوازيين و $(+ε)$ عندما يكونان متعاكسين من حيث الاتجاه. وفي كلتا الحالتين يمكن كتابة الطاقة على النحو الآتي $s_i s_j - ε s_i s_j$ على افتراض أن العزمين، i و j متجاوران. وعليه،

↑	↓	↓	↓	↑	↑	↑	↑	↓
↓	↓	↓	↓	↑	↑	↑	↑	↓
↑	↑	↑	↓	↓	↑	↑	↓	↓
↑	↓	↑	↑	↑	↑	↑	↓	↑
↑	↑	↑	↑	↑	↓	↑	↑	↑
↑	↑	↑	↑	↑	↑	↓	↑	↑
↓	↑	↑	↑	↑	↑	↓	↓	↓
↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑	↑
↑	↑	↓	↑	↑	↓	↓	↑	↑
↓	↑	↑	↑	↑	↓	↓	↓	↓

الشكل 3.8: واحدة من الحالات المحتملة الكثيرة لشبكة مربعة مقسمة إلى 10×10 مربعات أصغر لنموذج آيسنج ذي البعدين

(83) لا بد من ذكر أن هذا النموذج ليس تمثيلاً دقيقاً لمدة فيرومغناطيسية حقيقية. حتى في حالة توافر محور مغنطة مفضل، حتى لو كانت العزوم المغناطيسية تمتلك ترتيبين فقط في هذا الاتجاه، فإن ميكانيك الكم أقل يقيناً من هذا النموذج البدائي. ونظراً إلى أننا لا نقيس ترتيب العزوم المنفردة، لذا فإن مجموع العزوم المغناطيسية هو الحكم، وليس عزم كل جسيم منفرد. عند درجات الحرارة المنخفضة على سبيل المثال، فإن الحالات المهمة للفيرومغناطيس حقيقي هي المغنونات (Magnon) ذات أطوال أمواج طويلة التي يكون فيها معظم العزوم متوازية تقريباً، ووحدة من الاصطفاف المعاكس موزعة على عدد كبير من العزوم. لذا فإن نموذج آيسنج لا يعطي استنتاجات دقيقة لتصرف فيرومغناطيس عند درجات الحرارة المنخفضة. ولحسن الحظ، فهي أكثر دقة عند درجة حرارة كوري.

(84) لمراجعة تاريخية جيدة لنموذج آيسنج انظر مقالة Stephen G. Brush

"(History of the Lenz-Ising Model, "Reviews of Modern Physics 39, 883-893 (1967))".

فإن الطاقة الكلية للنظام من تفاعلات الجيران الأقرب يعبر عنها بالعلاقة الآتية:

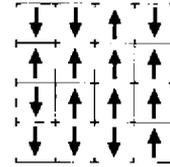
$$U = -c \sum_{\text{neighboring pairs } i,j} s_i s_j \quad (38.8)$$

ولتتمكن من التنبؤ بالتصرفات الحرارية للنظام، نحسب دالة التجزئ للنظام، وهي على النحو الآتي:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} e^{-\beta U} \quad (39.8)$$

حيث يتم جمع مجموعات اصطفااف العزوم المحتملة كلها. وعندما يكون عدد العزوم المغناطيسية يساوي N ، كل منها بحالتي اصطفااف محتملتين، فإن عدد الحدود في المجموع تساوي 2^N ، وهذا عدد كبير جداً في العادة. وعليه، فإن عملية جمع هذه الحدود لن يكون عملياً.

السؤال 15.8: في نموذج آيسنج ذي البعدين على شبكة مربعة، فإن كل عزم مغناطيسي، (بلستثناء الموجودة على الأطراف)، يجاور أربعة عزوم مغناطيسية: الأول أعلاه، والثاني أسفله، والثالث إلى يمينه، والرابع إلى يساره. (العزوم المجاورة على الأقطار غير مأخوذة في الحساب). ما الطاقة الكلية (بدلالة) للحالة الخاصة لنظام 4×4 شبكة مربعة، على نحو ما هو مبين في الشكل (4.8)؟



الشكل 4.8: حالة خاصة لنموذج آيسنج على شبكة مربعة 4×4 (السؤال 15.8).

السؤال 16.8: افترض أن نموذج آيسنج يحتوي 100 عزم مغناطيسي أساسي، وافترض أيضاً أنك ترغب في حساب دالة التجزئ، لهذا النظام مستخدماً جهاز حاسوب، يمكنه حساب مليار حد من دالة التجزئ في الثانية الواحدة. فكم تحتاج من الوقت إلى حساب الجواب؟

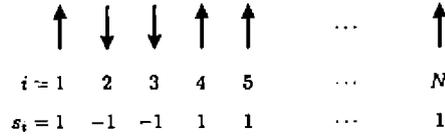
السؤال 17.8: افترض أن نموذج آيسنج يحتوي فقط على عزمين مغناطيسيين أساسيين، التفاعل بينهما بحسب طاقة تفاعل $\pm c$. رقم حالات هذا النظام، واكتب معاملات بولتزمان لها، ثم احسب دالة التجزئ للنظام، واحسب احتمال فيما إذا كان العزمان متوازيين، واحتمال كونهما متعاكسين، وارسم هذين الاحتمالين بوصفهما دالة من المتغير kT/c . كذلك احسب، وارسم طاقة النظام المتوسطة. عند أي درجة حرارة يكون احتمال اصطفااف العزمين في الاتجاه نفسه (إلى الأعلى) أكبر من احتمال أن يكون أحدهما إلى الأعلى والآخر إلى لأسفل؟

الحل التام في اتجاه واحد Exact Solution in one Dimension

حتى الآن، لم نحدد تماماً كيف تترتب العزوم المغناطيسية الذرية في الفضاء، أو عدد الجيران المباشرين لكل عزم من تلك العزوم. ولمحاكاة مادة فيرومغناطيسية حقيقية سنرتب تلك العزوم في ثلاثة أبعاد على شبكة بلورية. ولكننا سنبدأ بحالة ترتيب أسهل، وذلك بأخذ العزوم على صورة سلك في اتجاه واحد على خط. (انظر الشكل 5.8). وعليه، فإن لكل عزم مغناطيسي جارين قريبين فقط، ويمكن في هذه الحالة حساب مجموع دالة التجزئ حساباً تاماً.

ولنموذج آيسنج ببعد واحد، (دون وجود مجال خارجي) يعبر عن الطاقة بالعلاقة الآتية:

$$U = -c (s_1 s_2 + s_2 s_3 + s_3 s_4 + \dots + s_{N-1} s_N) \quad (40.8)$$



الشكل 5.8: نموذج آيسنج ببعد واحد لعدد N من العزوم المغناطيسية الأساسية.

وتصبح دالة التجزئء للنظام على النحو الآتي:

$$(41.8) \quad Z = \sum_{s_1} \sum_{s_2} \dots \sum_{s_N} e^{\beta \epsilon s_1 s_2} e^{\beta \epsilon s_2 s_3} \dots e^{\beta \epsilon s_{N-1} s_N}$$

حيث إن كل مجموع يأخذ على القيم (+1) و(-1) وتجدد الملاحظة بأن المجموع الأخير على s_N يساوي:

$$(42.8) \quad \sum_{s_N} e^{\beta \epsilon s_{N-1} s_N} = e^{\beta \epsilon} + e^{-\beta \epsilon} = 2 \cosh \beta \epsilon$$

بغض النظر فيما إذا كان s_{N-1} مساويًا (+1) أو (-1).

وبعد أن حسب المجموع على s_N ، نحسب المجموع على s_{N-1} بالطريقة نفسها، ثم المجموع على s_{N-2} وهكذا حتى نصل المجموع على s_2 . فتحصل بذلك على $N-1$ من المعامل $2 \cosh \beta \epsilon$. أما المجموع على s_1 فيعطي فقط المعامل 2، وعليه تصبح دالة التجزئء على النحو الآتي:

$$(43.8) \quad Z = 2^N (\cosh \beta \epsilon)^{N-1} \approx (2 \cosh \beta \epsilon)^N$$

حيث إن التقريب الأخير يكون صالحًا عندما يكون N كبيرًا جدًا.

وبعد أن حصلنا على دالة التجزئء، نحسب متوسط الطاقة بوصفها دالة من درجة الحرارة، وبطريقة مباشرة نحصل على النتيجة الآتية:

$$(44.8) \quad \bar{U} = -\frac{\partial}{\partial \beta} \ln Z = -N \epsilon \tanh \beta \epsilon$$

التي تؤول إلى $-N \epsilon$ عندما تؤول T إلى الصفر، وتؤول إلى الصفر عندما تؤول T إلى ما لا نهاية. لذا فإن العزوم المغناطيسية تصطف عشوائيًا عند درجات الحرارة المرتفعة (نصف الأزواج المتجاورة متوازية، ونصفها الآخر معاكسة)، في حين عند درجة حرارة الصفر تكون كلها مصطفة في الاتجاه نفسه، (محققة أقل طاقة وضع).

إن هاتين النتيجين لكل من دالة التجزئء ومتوسط الطاقة لهذا النظام، تكونان للنظام البارامغناطيسي ذي الحالتين أيضًا، خاصة إذا استبدلنا بالتفاعل المغناطيسي μB طاقة التفاعل بين الجارين ϵ . لكن العزمين المغناطيسيين يصفان هنا في الاتجاه نفسه بدلًا من اصطفاهما في اتجاه المجال المغناطيسي الخارجي.

ويجب ملاحظة أنه كلما أصبح النظام أكثر ترتيبًا (أقل عشوائيًا) انخفضت درجة الحرارة، وأن هذا الترتيب يحدث تدريجيًا. إن تصرف متوسط الطاقة، \bar{U} ، مع درجة الحرارة تصرف بطيء ومستمر دون أي تغيرات فجائية عند أي درجة حرارة غير صفرية. ومن الظاهر، أن نموذج آيسنج ذا البعد الواحد لا يتصرف بوصفه مادة فيرومغناطيسية حقيقية ذات ثلاثة أبعاد خاصة عند عدم وجود تغيرات فجائية. إن ميول أنظمة آيسنج ببعد واحد للمغطة ليس كبيرًا نظرًا إلى أن كل عزم مغناطيسي له جاران قريبان فقط.

ويجب أن تكون الخطوة المقبلة هي التعامل مع نموذج أيسنج في أبعاد أعلى، لكن لسوء الحظ، فإن هذه النماذج لا يمكن حلها بسهولة. لقد حُلَّ نموذج أيسنج ببُعدين على شبكة مربعة أول مرة عام 1940 من قبل لارس أنسيجار. لقد حسب أنسيجار دالة التجزئ التامة عندما $N \rightarrow \infty$ وبصيغة مغلقة، وقد وجد أن هذا النموذج يمتلك درجة حرارة حرجة تمامًا على نحو ما تفعل مادة فيرومغناطيسية حقيقية. ونظرًا إلى التعقيدات الرياضية الكبيرة لحل أنسيجار، فلن نحاول استعراضه في هذا الكتاب. وعلى كل حال، فلم يتمكن أحد لغاية الآن من إيجاد حل تام لنموذج أيسنج ثلاثي الأبعاد. وعليه، فمن الآن فصاعدًا لن نفكر في حل تام، ونعتمد عوضًا عن ذلك بالتقريبات.

السؤال 18.8: مبتدئًا بدالة التجزئ، احسب متوسط الطاقة لنموذج أيسنج ببعد واحد، وتحقق من المعادلة (44.8). وارسم الطاقة الكلية بوصفها دالة من درجة الحرارة.

تقريب المجال المتوسط The Mean Field Approximation

الآن نعرض تقريبًا بدائيًا يمكن عن طريقه حل نموذج أيسنج في أي بعديه. ولن يكون هذا التقريب دقيقًا، لكنه يعطي فكرة تحليلية عما يجري، ولماذا توجد أهمية للبعدية. لنركز الآن على عزم مغناطيسي واحد بالقرب من وسط الشبكة، وسنعطي هذا العزم الرقم i ، وعليه فإن اصطفاؤه S_i يساوي (1) و(-1) ولتكن n عدد أقرب الجيران له. ويمكن أن تأخذ n القيم الآتية:

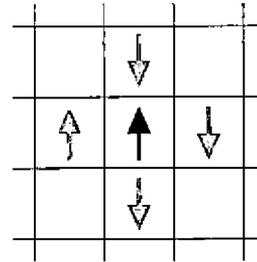
$$(45.8) \quad n = \begin{cases} 2 & \text{in one dimension;} \\ 4 & \text{in two dimensions (square lattice);} \\ 6 & \text{in three dimensions (simple cubic lattice);} \\ 8 & \text{in three dimensions (body-centered cubic lattice);} \\ 12 & \text{in three dimensions (face-centered cubic lattice).} \end{cases}$$

ولنتخيل أن اصطفااف العزوم المجاورة قد جمدت لحظيًا، مع بقاء العزم i حرًا ليصطف إلى الأعلى أو إلى الأسفل، وإذا كان العزم المغناطيسي i مصطفًا للأعلى، فإن طاقة تفاعله مع العزوم الأخرى المجاورة يعبر عنها بالعلاقة:

$$(46.8) \quad E \uparrow = -\epsilon \sum_{\text{neighbors}} S_{\text{neighbor}} = -\epsilon n \bar{S}$$

حيث \bar{S} متوسط الاصطفااف للعزوم المجاورة (انظر الشكل 6.8).

الشكل 6.8: نموذج أيسنج ببعد واحد لعدد N من العزوم المغناطيسية الأساسية.



وبالمثل إذا كان العزم المغناطيسي i مصطفًا إلى الأسفل، فإن طاقة التفاعل يعبر عنها على النحو الآتي:

$$(47.8) \quad E \downarrow = +en\bar{s}$$

وعليه، فإن دالة التجزيء لهذا العزم المغناطيسي يعبر عنها بالعلاقة الآتية:

$$(48.8) \quad Z_i = e^{\beta en\bar{s}} + e^{-\beta en\bar{s}} = 2\cosh(\beta en\bar{s})$$

ويكون متوسط القيمة المتوقعة لاصطفاف الزخم المغزلي للعزم المغناطيسي i على النحو الآتي:

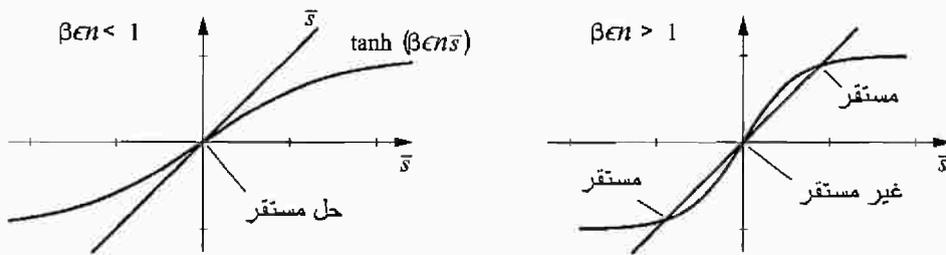
$$(49.8) \quad \bar{s}_i = \frac{1}{Z_i} [(1)e^{\beta en\bar{s}} + (-1)e^{-\beta en\bar{s}}] = \frac{2 \sinh(\beta en\bar{s})}{2 \cosh(\beta en\bar{s})} = \tanh(\beta en\bar{s}).$$

والآن، لننظر إلى طرفي المعادلة (49.8)، فعلى الطرف الأيسر من المعادلة \bar{s}_i القيمة الحرارية المتوسطة لاصطفاف أي عزم مغناطيسي تقليدي، (باستثناء تلك الموجودة على الأطراف)، وعلى الطرف الأيمن \bar{s} متوسط الاصطفاف اللحظي الحقيقي لجريان العزم i وعددهم n . وفكرة تقريب المجال المتوسط هي افتراض أن هاتين الكميتين متساويتان $\bar{s}_i = \bar{s}$. وبطريقة أخرى نفترض أنه عند كل لحظة يكون اصطفاف العزوم جميعها على نحو يجعل كل منطقة الجوار «تقليدية»، وهذا يعني أنه لا توجد تذبذبات تجعل المغنطة في أي منطقة جوار أكبر أو أقل من المتوسط الحراري المتوقع. (هذا التقريب يشبه التقريب الذي استخدم لاشتقاق معادلة فاندر فل) في الجزء (3.5) هناك، فإن الكثافة، بدلًا من اصطفاف الزخم المغزلي، هي التي لم يسمح لها بالتغير من موقع لآخر داخل النظام).

وفي تقريب المجال المتوسط يتوافق لدينا العلاقة الآتية:

$$(50.8) \quad \bar{s} = \tanh(\beta en\bar{s})$$

حيث \bar{s} الآن متوسط اصطفاف العزوم للنظام كله. وهذه معادلة حدية، ولا يمكن حل \bar{s} بدلالة βen . إن أفضل صريقة هي رسم طرفي المعادلة، والتطلع إلى حل بياني (انظر الشكل 7.8). من الملاحظ، أنه كلما كبرت قيمة βen ازداد انحدار الدالة $\tanh(\beta en\bar{s})$ بالقرب من $\bar{s} = 0$ ، وهذا يعني أن المعادلة (50.8) يمكن أن يكون لها حل واحد أو ثلاثة حلول اعتمادًا على قيمة βen .



الشكل 7.8: يمثل حلاً بيانيًا للمعادلة (50.8)، إن ميل الدالة $\tanh(\beta en\bar{s})$ ، عند نقطة الأصل، يساوي βen عندما تكون هذه القيمة أقل من 1، يكون هناك حل واحد للمعادلة عند $\bar{s} = 0$. لكن عندما تكون هذه القيمة أكبر من 1 فإن الحل $\bar{s} = 0$ غير مستقر، ولكن يوجد حلان إضافيان غير صفريين مستقرين.

وعندما تكون $\beta cn < 1$ ، يعني، عندما $kt > n\epsilon$ ، فإن الحل الوحيد للمعادلة هو $\bar{s} = 0$ ، وعليه فلا توجد أي مغنطة محصلة. وإذا كان أثر التذبذبات الحرارية هو الرفع اللحظي لقيمة \bar{s} ، عندها، فإن $\tanh(\beta \bar{e} n s)$ التي تحدد قيمة \bar{s} ستكون أقل من القيمة الحالية لـ \bar{s} ، وعليه فإن \bar{s} تميل إلى التناقص للأصغر، وعليه فإن الحل $\bar{s} = 0$ حل مستقر.

ولكن، عندما تكون $\beta cn > 1$ ، يعني عندما $kt < n\epsilon$ ، لا يزال الحل $\bar{s} = 0$ موجوداً، وأيضاً فإن للمعادلة حلين آخرين عند قيم موجبة وسالبة للمتوسط \bar{s} . لكن الحل عند $\bar{s} = 0$ حل غير مستقر. فذبذبة موجبة صغيرة في \bar{s} ستجعل $\tanh(\beta \bar{e} n s)$ تزيد على القيمة الحالية للمتوسط \bar{s} دافعة \bar{s} إلى قيم أعلى. الحلول المستقرة هي الحلان الأخران اللذان يحتلان موقعين متماثلين، حيث إن النظام لا يملك ميولاً ذاتياً نحو مغنطة موجبة أو مغنطة سالبة. وعليه، فإن النظام سيمتلك مغنطة غير صفرية، وبالاختمال نفسه أن تكون سالبة أو موجبة. وعندما يمتلك النظام مثل هذا التماثل لا بد من أن يختار إحدى الحالتين عند درجات الحرارة المنخفضة، عندها، نقول: إنه قد كُسر التماثل ذاتياً.

ويعبر عن درجة الحرارة الحرجة التي يصبح النظام دونها ممغنطاً بالعلاقة الآتية:

$$(51.8) \quad kT_c = n\epsilon$$

وتتناسب مع التفاعل بين الجارين وعدد العزوم المجاورة. وهذه نتيجة غير مفاجئة. فكلما ازداد عدد العزوم المجاورة ازدادت ميول النظام كلياً على التمتع. ويلاحظ هنا أن نموذج أيسنج بعيد واحد يصبح ممغنطاً تحت درجات حرارة أقل من $2\epsilon/k$ لكننا نعرف من الحل التام لنموذج أيسنج ذي البعد الواحد، عدم وجود انتقال مفاجئ، وتحصل المغنطة عند درجة حرارة الصفر فقط. ويبدو أن تقريب المجال المتوسط لا يصلح لحالة البعد الواحد⁽⁸⁵⁾. لكن لحسن الحظ، فإن دقة هذا التقريب تتحسن مع ارتفاع عدد أبعاد النموذج.

السؤال 19.8: علماً بأن درجة الحرارة الحرجة للحديد 1043 K، استخدم هذه القيمة لتقدر تقريباً التفاعل بين عزمين مغناطيسيين ϵ ، بوحدات eV.

السؤال 20.8: استخدم جهاز حاسوب، لرسم القيمة المتوسطة \bar{s} بوصفها دالة من kT/c ، كما يتوخى تقريب المجال المتوسط لنموذج أيسنج ثنائي الأبعاد (مستخدماً شبكة مربعة).

السؤال 21.8: تعطي المعادلة (50.8) القيمة $\bar{s} = 1$ عند درجة حرارة $T = 0$ ، احسب أول تصحيح يعتمد على درجة الحرارة لهذه القيمة، عندما تكون $\beta cn \gg 1$. قارن ذلك مع تصرف مادة فيرومغناطيسية حقيقية عند درجات الحرارة المنخفضة.

السؤال 22.8: خذ نموذج أيسنج بوجود مجال مغناطيسي خارجي B ، الذي يعطي العزم المغناطيسي طاقة إضافية مقدارها $(-\mu_B B)$ إذا كان اصطفاف العزم إلى الأعلى، أما إذا كان اصطفاف العزم إلى الأسفل فمقدار الطاقة الإضافية $(+\mu_B B)$ ، حيث (μ_B) هي العزم المغناطيسي. حلل هذا النظام مستخدماً تقريب المجال المتوسط لتجد معادلة مماثلة للمعادلة (50.8). ادرس حلول المعادلة بيانياً، وناقش مغنطة هذا النظام بوصفها دالة من قوة المجال المغناطيسي ودرجة الحرارة، ثم ارسم المنطقة في مستوى $T - B$ التي يكون لها ثلاثة حلول.

السؤال 23.8: يمكن استخدام نموذج أيسنج لمحاكاة أنظمة أخرى إضافة إلى المواد الفيرومغناطيسية،

(85) توجد نسخ أكثر تعقيداً من تقريب المجال المتوسط الذي لا يحتوي على هذه المشكلة القائلة، نسي بطريقة صحيحة أن نموذج

أيسنج ذا البعد الواحد يتمنط فقط عند $(T=0)$. انظر على سبيل المثال Pathria 1996.

والأمثلة على ذلك تتضمن المواد الفيرومغناطيسية المعاكسة، السبائك الثنائية، وحتى السوائل، ويسمى نموذج أيسنج لسائل باسم غاز الشبكة. لتخيل الفضاء مجزأ إلى شبكة من المواقع المشغولة بجزء من الغاز أو تاغرة. النظام هنا لا يمتلك أي طاقة حركية، وتأتي طاقة الوضع الوحيدة من تفاعل الجزيئات مع المواقع المجاورة. وبوجه خاص، توجد مساهمة للطاقة عن كل زوج من المواقع المتجاورة، عندما يكونان مشغولين بالجزيئات.

(أ) اكتب صيغة لدالة التجزيء العظمى لهذا النظام بوصفها دالة من T و u_0 و u .

(ب) أعد ترتيب الصيغة، وبين أنها مماثلة باستثناء معامل ضرب غير معتمد على حالة النظام، لدالة التجزيء العادية لمادة فيرومغناطيسية بحسب نموذج أيسنج في حالة وجود مجال مغناطيسي خارجي B ، شريطة استبدال $(u_0 \rightarrow 4\epsilon)$ و $(\mu \rightarrow 2\mu_B B - 8\epsilon)$ ، علمًا بأن μ الجهد الكيميائي للغاز و μ_B العزم المغناطيسي.

(ج) ناقش آثار نتائج الجزء (ب). أي حالة للمغناطيس تتلازم مع حالة الكثافة المنخفضة لغاز الشبكة؟ وأي حالة تتلازم مع حالة الكثافة العالية التي يتحول فيها الغاز إلى سائل؟ وما الشكل الذي يتوقعه النموذج للحد بين طوري الغاز والسائل في المستوى $P-T$ ؟

السؤال 24.8: سنستخدم في هذا السؤال تقريب المجال المتوسط لتحليل تصرف نموذج أيسنج بالقرب من النقطة الحرجة.

(أ) أثبت أن $\tanh x \approx \frac{1}{3}x^3$ عندما تكون $x \ll 1$.

(ب) مستخدمًا نتيجة الفرع (أ) أوجد صيغة المغنطة في تقريب المجال المتوسط، عندما تكون T قريبة من النقطة الحرجة. ستحصل على النتيجة $M \propto (T_c - T)^\beta$ ، حيث β (يجب ألا تلتبس مع $\beta = 1/kT$)، أس حرج يشبه β المعرفة للسائل في السؤال (55.5). ويظهر حل أنسبجارتام أن $\beta = 1/8$ لنظام في بعدين، في حين تظهر التجارب والتقريبات الأكثر تطورًا أن $\beta \approx 1/3$ لنظام ثلاثي الأبعاد لكن تقريب المجال المتوسط يتنبأ بقيمة أعلى.

(ج) تُعرف الاستجابة المغناطيسية χ ، بالعلاقة الآتية $\chi \equiv (\partial M / \partial B)_T$ ، ويكتب تصرف تلك الكمية قرب النقطة الحرجة عادة على الصورة $\chi \propto (T - T_c)^{-\gamma}$ ، حيث γ أس حرج آخر. أوجد قيمة γ بتقريب المجال المتوسط، وبين أنها لا تعتمد على كون T أقل أو أكبر قليلاً من T_c .
(القيمة الدقيقة لنظام في بعدين $\gamma = 7/4$ ، ولنظام في ثلاثة أبعاد $\gamma \approx 1.24$).

محاكاة مونت كارلو Monte Carlo Simulation

افترض أن نموذج أيسنج ببعدين وبحجم متوسط على شبكة مربعة، ويحتوي بحدود 100 عزم مغناطيسي أساسي (على نحو ما هو مبين في الشكل 3.8). على الرغم من أن أسرع حاسوب لا يمكنه أبداً حساب الاحتمال لجميع الحالات المحتملة لهذا النظام، فإنه قد يكون غير ضروري أخذ هذه الحالات جميعها في الحسبان، وربما أخذ عينة عشوائية مكونة من مليون حالة تقريباً، قد يكون كافيًا. هذه هي فكرة جمع أو تكامل مونت كارلو. خطوات هذه الطريقة هي إنتاج عينة عشوائية من أكبر عدد ممكن من الحالات، حساب معاملات بولتزمان

لهذه الحالات، ومن ثم استخدام هذه العينة العشوائية في حساب متوسط الطاقة، ومتوسط المغنطة، وكميات ديناميكية حرارية أخرى.

لسوء الحظ، فإن الخطوات التي وضعت لا تصلح لنموذج آيسنج، فلو تعاملنا مع مليار حالة، فإن هذا العدد لا يزال جزءاً صغيراً جداً، ويمثل واحداً من 10^{21} من جميع حالات شبكة متواضعة مكونة من 10×10 مواقع. فمثلاً، عند درجات الحرارة المنخفضة التي يبدأ عندها النظام بالتمغنط، فإن عدد الحالات المهمة (التي تكون فيها جميع العزوم المغناطيسية مصطفة في الاتجاه نفسه) يكون جزءاً بسيطاً من عدد الحالات الكلية التي قد لا تظهر في العينة العشوائية. لذا فإن أخذ عينة عشوائية من الحالات ليس له كفاءة كافية. لذا فإن هذه الطريقة تسمى في بعض الأحيان طريقة مونتي كارلو البدائية.

إن الفكرة الفضلى هي اتخاذ معاملات بولتزمان دليلاً خلال إنتاج مجموعة أصغر لأخذ عينة منها. وإحدى الخوارزميات المتبعة في ذلك هي التي تتبع الخطوات الآتية: ابدأ بأي حالة مهما كانت، ثم اختر عشوائياً عزماً مغناطيسياً، أخذاً في الحسبان إمكانية عكس اتجاهه. احسب الفرق في الطاقة ΔU ، الناتجة عن عكس الاتجاه. إذا كانت $\Delta U \leq 0$ ، فإن طاقة النظام ستقل أو تبقى ثابتة. اعكس اتجاه هذا العزم المغناطيسي، وحقق الحالة الثانية للنظام. لكن إذا كانت $\Delta U > 0$ حيث تزداد طاقة النظام، فقرر عشوائياً عكس اتجاه العزم، المغناطيسي أم لا، وباحتمال عكس اتجاه مساو $e^{-\Delta U/kT}$. وإذا لم يتم عكس اتجاه العزم، فإن الحالة الجديدة للنظام هي حالة النظام السابقة نفسها. على كل حال، استمر في الاختيار العشوائي لعزم مغناطيسي آخر، وكرر العملية مراراً وتكراراً حتى يكون كل عزم مغناطيسي قد حصل على فرص كثيرة لعكس اتجاهه. إن هذه الخوارزمية تعرف باسم خوارزمية متروبوليس نسبة إلى نيكولاس متروبوليس المؤلف الأول لمقالة نشرت عام 1953 (٢٦)، وتسمى هذه التقنية تقنية مونتي كارلو «للجمع» باختيار أهمية العينات.

وتنتج خوارزمية متروبوليس مجموعة أصغر من حالات النظام تحصل فيها حالات الطاقات الأقل، بصورة أكثر تكراراً من الحالات ذوات الطاقات الأعلى. بتفصيل أكثر، لماذا تنتج خوارزمية متروبوليس، نفترض فقط حالتين: الحالة الأولى 1 والحالة الثانية 2، والفرق بين هاتين الحالتين هو عكس اتجاه عزم مغناطيسي واحد. لنفترض أن طاقة النظام U_1 ، في الحالة الأولى والحالة الثانية، ولتكن $U_2 \leq U_1$. إذا كان النظام في البداية في الحالة 2، فإن احتمال أن ينتقل النظام إلى الحالة 1 يساوي $(1/N)$ ، ببساطة، يساوي احتمال أن يكون العزم الصحيح قد اختير عشوائياً من بين جميع العزوم الأخرى جميعاً. أما إذا كان النظام في البداية في الحالة 1، فإن احتمال انتقاله إلى الحالة 2 يساوي $(1/N)e^{-(U_2-U_1)/kT}$. اعتماداً على خوارزمية متروبوليس، فإن النسبة بين احتمالي هذين الانتقالين هي:

$$(2.8) \quad \frac{P(1 \rightarrow 2)}{P(2 \rightarrow 1)} = \frac{(1/N)e^{-(U_2-U_1)/kT}}{(1/N)} = \frac{e^{-U_2/kT}}{e^{-U_1/kT}}$$

ببساطة، النسبة بين معاملي بولتزمان للحالتين. وإذا كانت هاتان الحالتان الوحيدتين المتاحتين للنظام، فإن

(٢٦) N. Metropolis, A.W. Rosenbluth, M.N. Rosenbluth, A.H. teller and E. Teller "Equation of state Calculations for fast Computing Machines", Journal of Chemical Physics 21 1087-1092 (1953).

في هذه المقالة استخدم المؤلفون خوارزمية لحساب الضغط لغاز ثنائي الأبعاد مكون من 224 قرصاً صلباً. لقد استغرقت عملية الحساب المتواضعة هذه أياماً عدة، وذلك باستخدام أكثر أجهزة الحاسوب تطوراً في حينه.

عدد مرات حدوثهما تكون النسبة بنفسها، على نحو ما يتطلب إحصاء بولتزمان⁽⁸⁷⁾. بعد ذلك تعدّ حالتين أخريين الحالة 3 والحالة 4 وهما تختلفان عن الحالة 1 والحالة 2 فقط بعكس اتجاه تزم مغناطيسي آخر. ويمكن للنظام الانتقال من الحالة 1 إلى الحالة 2 من خلال العملية غير المباشرة $2 \leftrightarrow 4 \leftrightarrow 3 \leftrightarrow 1$ ، ونسبة معدلات حدوثهما في الاتجاهين المتعاكسين يعبر عنها بالعلاقة الآتية :

$$(53.8) \quad \frac{\mathcal{P}(1 \rightarrow 3 \rightarrow 4 \rightarrow 2)}{\mathcal{P}(2 \rightarrow 4 \rightarrow 3 \rightarrow 1)} = \frac{e^{-U_1/KT} e^{-U_4/KT} e^{-U_2/KT}}{e^{-U_1/KT} e^{-U_3/KT} e^{-U_4/KT}} = \frac{e^{-U_2/KT}}{e^{-U_3/KT}}$$

مرة أخرى، كما يتطلب إحصاء بولتزمان، وتنطبق النتيجة نفسها على انتقالات تحتوي على عدد من الخطوات، وعلى انتقالات بين حالات تختلف بعكس اتجاه عزم مغناطيسي واحد. لذا فإن خوارزمية متروبوليس في الحقيقة، تنتج حالات باحتمالات بولتزمان الصحيحة.

ولتحدث بدقة، فإن هذه النتيجة تنطبق فقط عندما تكون هذه الخوارزمية قد شغلت فترة طويلة جداً، حيث تُنتج كل حالة مرات كثيرة. لكننا نود أن نجعل هذه الخوارزمية تعمل فترة قصيرة نسبياً، هذا يؤدي إلى عدم إنتاج معظم الحالات على الإطلاق. لا توجد أي ضمانات تحت هذه الظروف، بأن المجموعة الصغيرة من الحالات التي أُنتجت تمثل المجموعة الكلية لحالات النظام جميعها بدقة معقولة. لكن في الحقيقة ليس أمراً سهلاً تعريف المقصود بتمثيل دقيق. في حالة نموذج أيسنج، فإن اهتماماتنا الرئيسة هي أن تقدم الحالات المنتجة عشوائياً صورة عن الطاقة والمغنطة المتوقعتين للنظام. عملياً، فإن أهم استثناء هو أن خوارزمية متروبوليس عد درجات الحرارة المنخفضة ستدفع النظام بسرعة إلى حالة قليلة من الاستقرار، التي تكون فيها العزوم جميعها مصطفة في اتجاه جيرانها نفسه.

وعلى الرغم من أن احتمال حدوث هذه الحالة احتمال جيد، بحسب إحصاء بولتزمان إلا أن خوارزمية متروبوليس تحتاج إلى وقت طويل لإنتاج حالات أخرى محتملة تختلف عنها اختلافاً مهماً، مثلاً كأن يكون كل عزم مغناطيسي قد عكس اتجاهه. (وبهذه الطريقة فإن خوارزمية متروبوليس مماثلة لما يحدث في العالم الحقيقي، حيث لا يتوافر الوقت الكافي لنظام كبير لاكتشاف جميع الحالات المجهرية المتاحة له، وحيث يكون زمن الاسترخاء للوصول إلى اتزان حراري حقيقي طويلاً جداً). آخذين في الحسبان هذه المحددات كلها، لنبدأ بتطبيق خوارزمية متروبوليس. ويمكن برمجة هذه الخوارزمية بأي لغة حاسوب تقليدية، وبلغات أخرى غير تقليدية. لكن عوضاً عن اختيار لغة بعينها، دعنا نقدم الخوارزمية على شكل (رمز وهمي) يمكن ترجمته لأي لغة تُختار.

ويبين الشكل (8-8) برنامجاً مكتوباً بالرمز الوهمي لمحاكاة نموذج أيسنج أساسي ذي بعدين. وينتج هذا البرنامج نتائج جرافيكية فقط، مبيناً الشبكة على صورة صف من المربعات الملونة، لَوْن العزوم المصطفة إلى الأعلى بلون معين، ولَوْن العزوم المصطفة إلى الأسفل بلون آخر. يعكس كل مرة أحد العزوم اتجاهه، ويتغير لون المربع الملازم له؛ لذا تستطيع أن ترى تماماً تتابع الحالات المنتجة. ويستخدم البرنامج صفّاً ذا بعدين يطلق عليه $S(i,j)$ لتخزين قيم اصطفااف الزخم المغزلي، ويتغير العدداً من 1 إلى عدد يمكن تغييره لنتمكن من محاكاة شبكات بحجوم مختلفة.

(87) عندما تكون نسبة معدلات الانتقال بين حالتين النسبة الصحيحة، نقول: إن الانتقالين في حالة اتزان مفصل.

Program ising	Monte Carlo simulation of a 2D Ising model using the Metropolis algorithm
size = 10	Wight of square lattice
T = 2.5	Temperature in unints of c/k
initialize	
for iteration = 1 to 100*size-2 do	Main iteration loop
i = int(rand*size+1)	Choose a random row number
j = int(rand*size+1)	and a random coloumn number
deltaU(i,j,Ediff)	Compute of hypothetical flip
if Ediff <= 0 then	If flipping reduces the energy...
s(i,j) = -s (i,j)	the flip!
colorsquare(i,j)	
else	
if rand < exp(-Ediff/T) then	otherwise the Boltzmann factor
s(i,j) = _s(i,j)	gives the probability of flipping
colorsquare(i,j)	
end if	
end id	
next iteration	Now go back and start over ...
end program	
subroutind deltaU (i,j,Ediff)	Compute U of flipping a dipole (note periodic boundary conditions)
if i = 1 then top = s(size,j) else to = s (i-1,j)	
if i = size the top = s(1,j) else bottom = s (i+1,j)	
if i = 1 then left = s(i,size) else left = s (i,j-1)	
if i = size then right = s(i,1) else right = s (i,j+1)	
Ediff = 2*s(i,j)*(top+bottom+left+right)	
end subroutine	
subroutine initialize	Initialiae to a random array
for i = 1 to size	
for j = 1 to size	
if rand < .5 then s(i,j) = 1 else s(i,j) = -1	
colorsquare(i,j)	
next j	
next i	
end subroutine	
subroutine colorsquare(i,j)	Color a square according to a value (implementation depends on system)

الشكل 8-8: برنامج مكتوب برمز وهمي لمحاكاة نموذج آيسنج ذي البعدين باستخدام خوارزمية متروبوليس.

ويمكن تغيير درجة الحرارة T ، المقاسة بوحدات ϵ/k في الحسابات المختلفة، وبعد تحديد هذين الثابتين يقوم البرنامج بطلب البرنامج الفرعي initialize ليعطي قيمًا عشوائية لكل $s^{(88)}$.

إن أهم جزء في البرنامج هو الدور الرئيس للعمليات التكرارية المتتالية، الذي ينفذ خوارزمية متروبوليس 100 مرة لكل عزم مغناطيسي، حيث تتوافر لكل عزم فرص كثيرة لعكس اتجاهه. ويمكن تغيير العدد 100 إلى أي عدد ملائم. (لاحظ أن * تمثل عملية ضرب، وتمثل الرفع للأس). وفي الدور نختار أولاً عزمًا مغناطيسيًا بطريقة عشوائية. الدالة rand تدخل العدد العشوائي الحقيقي بين 0 و 1. في حين تدخل الدالة (int) أكبر عدد صحيح أصغر أو مساوٍ لمتغيره. البرنامج الفرعي deltaU المعرف لاحقًا بالبرنامج يحسب التغير في الطاقة عند العكس الافتراضي لاتجاه العزم المغناطيسي المختار. هذا التغير في الطاقة يدخل على شكل Ediff. إذا كان Ediff سالبًا أو صفرًا انعكس اتجاه العزم المغناطيسي، في حين بينما إذا كان Ediff موجبًا نستخدمه لحساب معامل بولتزمان، ونقارن هذا بعدد عشوائي، لنقرر فيما إذا كنا سنعكس اتجاه العزم أم لا. إذا تم عكس اتجاه العزم نطلب البرنامج الفرعي Colorsquare لتغيير لون المربع الملازم على الشاشة.

ويحتاج البرنامج الفرعي delta U إلى تفسير أبعد من ذلك؛ لأنه عندها تستخدم المحكاة شبكية صغيرة، فننا نواجه دائمًا مشكلة التعامل مع تأثير الحواس. إن العزوم المغناطيسية الموجودة على الحواف أقل إكراهًا على الاصطفاف مع جيرانها. وعندما نضع نموذجًا لنظام صغير جدًا، حجمه يساوي حجم الشبكية المحكاة، فننا نعامل الحواف بعدد أقل في الجيران لكل عزم مغناطيسي موجود فيها. لكن إذا كنا مهتمين بتصرف أظلمة أكبر كثيرًا عندئذ يجب محاولة تقليل أثر الحواف. إحدى الطرق لعمل ذلك هي جعل الشبكية تلتف على بعضها، بحيث نعامل الحافة اليمنى كأنها مباشرة يسار الحافة اليسرى، ونعامل الحافة السفلى كأنها مباشرة فوق الحافة العليا. فيزيائيًا يشبه هذا وضع صف العزوم على سطح حبة دونت (Donut). تفسير آخر لهذا الالتفاف، هو تخيل أن الشبكية مستوية ولا نهائية في الاتجاهات جميعها، لكن حالتها دومًا دورية تمامًا، حيث لو تحركنا إلى الأعلى، أو إلى الأسفل، أو إلى اليسار، أو إلى اليمين بمقدار معين (مقدار الحجم) لوصلنا إلى مكان مكافئ، حيث العزوم المغناطيسية تمتلك الاصطفاف نفسه عند أي زمن. اعتمادًا على هذا التفسير، فإننا نستخدم شروطًا دورية. وبالعودة إلى البرنامج الفرعي deltaU، نلاحظ أنه يحدد دائمًا، وبطريقة صحيحة، الجيران الأقرب الأربعة، بغض النظر عما إذا كان العزم المختار يقع على الحواف أم لا، ويكون التغير في الطاقة عند عكس العزم اتجاهه مساويًا لضعف حاصل ضرب $s(i, j)$ مع s للجيران مجموعًا على الجيران الأربعة.

ولتحويل الرمز الوهمي إلى برنامج حقيقي يُشغل على حاسوب حقيقي، حيث يتم اختيار نظام حاسوب ولغة برمجة. إن دورات التركيب للعمليات الرياضية وتحديد المتغيرات... إلخ، تختلف من لغة إلى أخرى، فتقدم أي لغة برمجة مألوفة وطرقًا سهلة لعمل هذه الأشياء، وبعض اللغات تتطلب إعلان المتغيرات، وإعطاءها أنواعًا معينة (أعدادًا صحيحة) أو حقيقية، في بداية البرنامج. تتطلب المتغيرات التي تعالج في البرنامج الرئيس، والبرامج الفرعية عناية خاصة. إن أقل الأمور أساسية في جميع الأمور المتداولة هي الجرافيك، فمحتويات البرنامج الفرعي colorsquare تتغير كثيرًا من نظام إلى آخر، لكننا نأمل ألا تواجه صعوبات كثيرة في تطبيق هذا البرنامج على جهازك المفضل، وتجعله صالحًا للتشغيل.

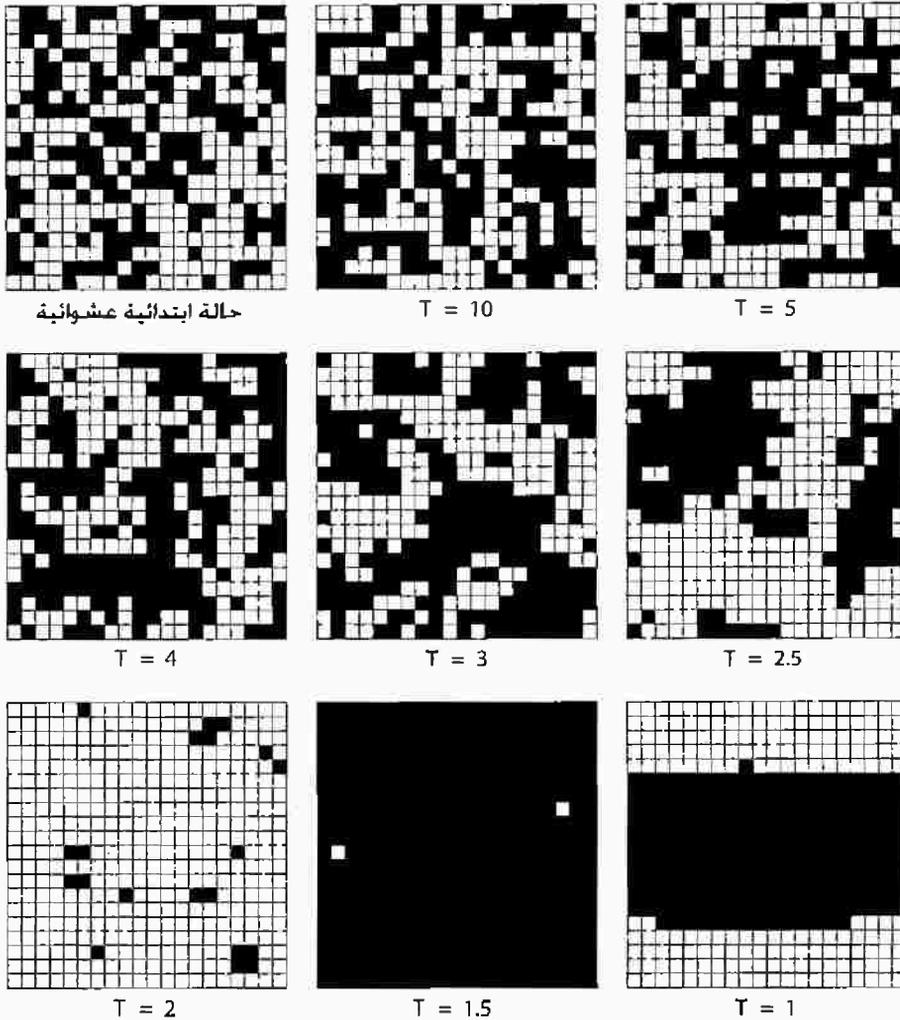
(83) من حيث المبدأ، فإن الحالة الابتدائية قد تكون أي شيء، لكن عمليًا، فإن اختيار الحالة الابتدائية قد يكون مهمًا، إذا لم تكن نرغب في الانتظار بلا حدود حتى يتزن النظام إلى حالة تقليدية. ويصبح اختيار الحالة الابتدائية عشوائيًا جيدًا عند درجات الحرارة المرتفعة، في حين يصبح اختيار الحالة الابتدائية حالة ممغنطة كليًا عند درجات الحرارة المنخفضة.

إن تشغيل برنامج أيسنج له متعة عظيمة، حيث ستتمكن من مراقبة المربعات، وهي تغير ألوانها باستمرار، في حين يحاول النظام إيجاد حالات ذات معاملات بولتزمان كبيرة. وفي الحقيقة، فإنها مغرية لجعلك تتخيل كأنك تراقب محاكاة لما يجري في حقيقة الأمر في مغناطيس كلما غيرت العزوم المغناطيسية اصطفاها إلى الأمام وإلى الخلف مع مرور الزمن. وبسبب هذا التشابه، فإن برنامج مونتي كارلو الذي يستخدم في اختيار العينات المهمة عادة يسمى محاكاة مونتي كارلو. لكن تذكر، أننا لم نحاول محاكاة تصرف المغناطيس مع الزمن المتغير، لكن عوضاً عن ذلك استخدمنا ديناميكا وهمية، تعكس اتجاه عزم مغناطيسي واحد على حدة، وتهمل الديناميكا المعتمدة على الزمن المتغير. إن الصفة الواقعية الوحيدة، أنها تنتج حالات باحتمالات تتناسب مع معاملات بولتزمان تماماً على نحو ما تفعل الديناميكية الحقيقية للمغناطيس.

ويبين الشكل (8-9) مخرجات جرافيكية لبرنامج أيسنج لشبكة 20×20 ، وتبين الصورة الأولى حالة ابتدائية عشوائية أنتجت عن طريق البرنامج، في حين تبين كل من الصور الباقية الحالة النهائية عند إتمام 40,000 عملية تكرارية متتالية (100 لكل عزم) عند درجات حرارة مختلفة، وعلى الرغم من أن هذه الصور الثابتة لا تمثل بديلاً عن مشاهدة البرنامج في العمل، لكنها تظهر كيف تبدو أي حالة تقليدية. الحالة النهائية، عند $T = 10 \text{ K}$ لا تزال عشوائية مع ميول بسيطة فقط للعزوم للاصطفاف مع جيرانها. وباستمرار تقليل درجة الحرارة تميل العزوم إلى تكوين تجمعات أكبر فأكبر⁽⁸⁹⁾ بمغطة موجبة وسالبة حتى درجة الحرارة $T = 2.5 \text{ K}$ ، عندئذ تصبح التجمعات مساوية في حجمها حجم الشبكة نفسها تقريباً. أما عند درجة الحرارة $T = 2 \text{ K}$ ، فإن تجمعاً واحداً فقط يملأ الشبكة كلها، ونقول عندها: إن النظام أصبح ممغنطاً. وتستمر بعض التجمعات الصغيرة من العزوم بعكس اتجاهها بين الحين والآخر، ولكنها لا تبقى كذلك طويلاً. ولا بد من الانتظار فترة طويلة جداً لتقوم الشبكة كلها بعكس اتجاه عزومها، حيث تصبح في حالة المغنطة المعاكسة وعند درجة الحرارة تلك، فإن تذبذبات العزوم المنفردة تصبح غير مألوفة. وربما نتوقع عند $T = 1 \text{ K}$ ، أن يصبح النظام كله ممغنطاً بالكامل، ويبقى على هذه الحالة، وفي الحقيقة، فإن النظام يقوم بذلك أحياناً. لكن النظام يبقى نصف الوقت تقريباً في حالة قليلة الاستقرار بمنطقتين إحداهما موجبة التمغنط، والثانية سالبة التمغنط على نحو ما هو مبين في الشكل.

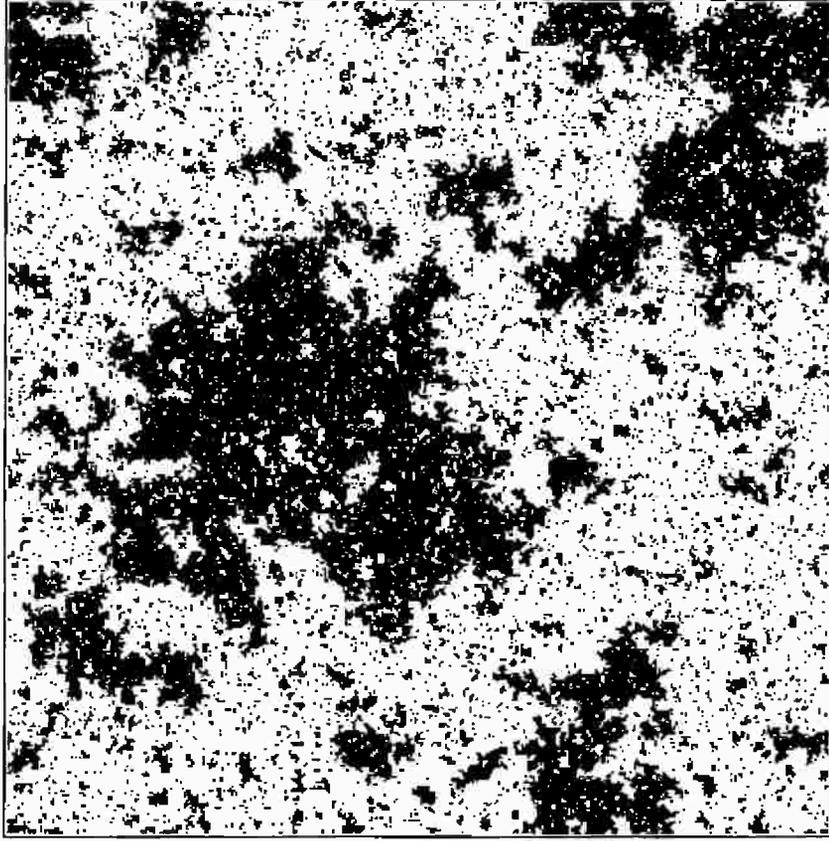
اعتماداً على هذه النتائج، نستطيع أن نقرر أن هذا النظام له درجة حرارة حرجة، تقع بين 2.0 و 2.5 بوحدات $\frac{\epsilon}{k}$. تذكر أن تقريب المجال المتوسط يتنبؤ درجة حرارة حرجة مساوية $\frac{4\epsilon}{k}$ ، ليست سيئة، على الرغم من أنها تختلف بمعامل 2 تقريباً، لكن الشبكة المكونة من 20×20 خلية، هي صغيرة للغاية، وماذا يحدث في محاكاة أكبر وأكثر واقعية؟

(89) نحن لا نحاول هنا أن نعرف التجمع بدقة - فقط انظر إلى الصور، واستخدم الحدس. ويعطي السؤال 29.8 تعريفاً حذراً لحجم التجمع.



الشكل 9.8: مخرجات جرافيكية لثمانى عمليات تشغيل لبرنامج أيسنغ. على درجات متناقصة، إن كل مربع أسود يمثل عزمًا مصطفًا إلى الأعلى، وكل مربع أبيض يمثل عزمًا مصطفًا إلى الأسفل. المتغير T يمثل درجة الحرارة بوحدة ϵ/k .

إن الجواب على هذا السؤال ليس صعبًا للتوقع. فما دام أن درجة الحرارة مرتفعة، بحيث يكون حجم التجمع أصغر كثيرًا من الشبكة، فإن تصرف النظام لن يعتمد كثيرًا على حجم الشبكة. لكن كلما كان حجم الشبكة أكبر، سمح هذا بتكوين تجمعات أكبر؛ لذا لا بد من استخدام شبكة كبيرة قدر قرب درجة الحرارة الحرجة الإمكان. وباستخدام أوقات تشغيل طويلة وشبكات كبيرة يمكن أن تبين أن حجم أكبر التجمعات يؤول إلى ما لا نهاية عند درجة حرارة $2.27 \epsilon/k$ (انظر الشكل 10.8). وعليه، فإن درجة الحرارة هذه هي درجة الحرارة الحرجة الحقيقية، وهذه النتيجة تتفق مع حل أنسيجار التام لنموذج أيسنغ ذي البعدين.



الشكل 10.8: حالة تقليدية أُنتجت باستخدام برنامج أيسنج بعد مليارات عدة من العمليات التكرارية المتتالية لشبكة مكونة من 400×400 خلية، عند درجة حرارة $T = 2.27$ (درجة الحرارة الحرجة). ويلاحظ وجود تجمعات بجميع الحجم الممكنة، ابتداءً من عزم واحد وانتهاءً بحجم الشبكة كلها.

وقد أُجريت محاكاة مشابهة، لنموذج أيسنج ثلاثي الأبعاد، لقد احتاج ذلك إلى وقت حاسوب أطول كثيرًا، وكانت عملية عرض النتائج أصعب كثيرًا. ولشبكة مكعبة بسيطة، نحصل على درجة حرارة حرجة مساوية $\frac{4.5\epsilon}{k}$ تقريبًا، ومرة أخرى أقل قليلًا من تنبؤات تقريب المجال المتوسط. ويمكن تطبيق طريقة مونتي كارلو على نماذج أكثر تعقيدًا للفيرومغناطيسية، ومدى واسع من الأنظمة الأخرى كالموائع، والسبائك، والنوى، والجسيمات الأولية.

السؤال 25.8: لقد حسب في السؤال (15.8) الطاقة لحالة معينة لشبكة مكونة من 4×4 خلايا. أعد الحل باستخدام الشروط الحدية الدورية.

السؤال 26.8: استعمل برنامج أيسنج مستخدمًا حاسوبك المفضل، ولغة البرمجة المفضلة لديك. وشغل هذا البرنامج لحجوم شبكات مختلفة وعند درجات حرارة مختلفة، وراقب النتائج، وخاصة:

(أ) شغل هذا البرنامج لشبكة مكونة من 20×20 خلية، عند درجات حرارة $T = 10, 5, 4, 3, 2.5 K$ على الأقل 100 عملية تكرارية متتالية لكل عزم مغناطيسي لكل عملية حسابية بالحاسوب. وقدر حجم أكبر تجمع عند كل درجة حرارة.

(ب) أعد الفرع (أ) ولكن لشبكة 40×40 . هل يختلف حجم التجمعات؟ فسّر إجابتك.

(ج) شغل البرنامج لشبكة مكونة من 20×20 خلية عند درجات حرارة $T = 2, 1.5, 1 K$. وقدر متوسط المغنطة (نسبة مئوية من التمغنط المشبع)، عند كل درجة حرارة من تلك الدرجات، مهملاً التشغيلات التي يعلق فيها النظام في حالة قليلة الاستقرار بمنطقتين.

(د) شغل البرنامج لشبكة مكونة من 10×10 خلايا عند درجة حرارة $T = 2.5 K$ ، وراقب البرنامج في العمل 100,000 عملية تكرارية متتالية، ثم صف واشرح تصرف النظام.

(و) استخدم شبكات ذات حجوم متزايدة لتقدير حجم تجمع تقليدي، عند درجات حرارة من 2.5 نزولاً حتى $2.27 K$ (درجة الحرارة الحرجة). وكلما اقتربت من الدرجة الحرجة احتجت إلى شبكة أكبر، وإلى زمن أطول لتشغيل البرنامج. توقّف عندما تشعر أن هناك أشياء أفضل لقضاء وقتك. وهل من الواضح أن حجم التجمع يؤوّل إلى ما لا نهاية عندما تقترب درجة الحرارة من الدرجة الحرجة؟

السؤال 27.8: عدّل برنامج أيسنج لحساب الطاقة المتوسطة لنظام على العمليات التكرارية المتتالية جميعها. ولعمل ذلك، أضف رمزاً إلى البرنامج الفرعي initialize لحساب الطاقة الابتدائية للشبكة، وبعدها غير متغير الطاقة، كل مرة يعكس اتجاهه عزمًا مغناطيسيًا، إلى الكمية الملائمة. وتأكد من حساب متوسط الطاقة على العمليات التكرارية المتتالية جميعها، ليس فقط على العمليات التي عكس اتجاه العزم عليها (لماذا؟). شغل البرنامج لشبكة مكونة من 5×5 خلايا وعند درجات حرارة من 4 إلى 1 وتغيرات صغيرة نسبيًا، وبعد ذلك ارسم متوسط الطاقة بوصفه دالة من درجة الحرارة. وكذلك ارسم السعة الحرارية، ثم استخدم 1000 عملية تكرارية متتالية لكل عزم، ولكل عملية تشغيل على الأقل، ومن المفضل أكثر من ذلك. وإذا كان جهاز الحاسوب المستخدم سريعًا، فأعد الحسابات لشبكة 10×10 وشبكة 20×20 . وناقش النتائج. (بدلاً من الابتداء عند درجة حرارة بحالة ابتدائية عشوائية، بإمكانك توفير الوقت بالبدء بأخر حالة أنتجت عند درجة الحرارة القريبة السابقة. ولشبكات أكبر حجمًا يمكنك توفير بعض الوقت بافتراض مدى درجات حرارة أصغر، مثلاً من 3 إلى 1.5).

السؤال 28.8: عدّل برنامج أيسنج لحساب متوسط المغنطة (مجموع قيم s كلها) لكل عملية تكرارية ولعدّد عدد المرات التي تحدث فيها حالة مغنطة محتملة خلال التشغيل الواحدة. وارسم النتيجة على شكل رسم العينات. شغل البرنامج لشبكة 5×5 عند درجات حرارة مختلفة، وناقش النتائج. ثم ارسم بيانيًا قيمة المغنطة الأكثر احتمالاً بوصفها دالة من درجة الحرارة. وإذا كان جهاز الحاسوب المستخدم سريعًا؛ أعد الحسابات لشبكة 10×10 .

السؤال 29.8: لإعطاء قيم لتجمعات الاضطفاف في مغناطيس أيسنج، نعرف كمية تسمى دالة الارتباط $c(r)$. خذ أي عزمين i و j يبعدان مسافة r عن بعضهما، واضرب حالتيهما $s_i s_j$. حاصل الضرب يساوي 1 إذا كان العزمان متوازيين و -1 إذا كانا في اتجاهين متعاكسين. ثم احسب متوسط هذه الكمية على جميع الأزواج المفصولة بمسافة ثابتة r للحصول على قياس لميول العزمين، ليكونا مرتبطين على هذه المسافة. وفي النهاية اطرح مربع المتوسط s لتحديد أي أثر للمغنطة الكلية. ويعبر عن دالة الترابط بالعلاقة الآتية:

$$c(r) = \overline{s_i s_j} - \overline{s}^2$$

ويجب أن يفهم أن متوسط الحد الأول يحسب على جميع الأزواج على بعد ثابت r . تقنيًا يجب أخذ المتوسطات على جميع الحالات المحتملة للنظام.

(أ) أضف برنامجًا فرعيًا إلى برنامج أيسنج لحساب دالة الارتباط للحالة الآتية للشبكة، آخذًا المتوسط على جميع الأزواج مبتعدين عن بعضهما أفقيًا أو عموديًا (لكن ليس قطريًا) بعدد r من الوحدات الخاصة بالمسافة، حيث تتغير r من 1 إلى نصف حجم الشبكة. ثم اجعل البرنامج ينفذ البرنامج الفرعي دوريًا، وارسم النتائج بيانيًا.

(ب) شغل البرنامج عند درجات حرارة مختلفة أعلى وأقل، وقرّبنا من النقطة الحرجة، واستخدم شبكة بحجم 20 على الأقل، ويفضل أن تكون أكبر (خصوصًا عند درجة الحرارة الحرجة)، وصف دالة الارتباط وتصرفها عند كل درجة حرارة.

(ج) أضف الآن رمزًا إلى حساب متوسط دالة الارتباط على متوسط زمن عملية التشغيل. (من الأفضل أن يترك النظام ليتزن في حالة تقليدية قبل البدء بتراكم المتوسط). ويعرف طول الارتباط بالمسافة التي تتناقص خلالها دالة الارتباط إلى $1/e$ من القيمة الابتدائية، قدّر طول الارتباط عند كل درجة حرارة، وارسم بيانيًا طول الارتباط بوصفه دالة من درجة الحرارة.

السؤال 30.8: عدّل برنامج أيسنج لمحاكاة نموذج أيسنج أحادي الأبعاد لشبكة:

(أ) ذات الحجم 100، وراقب تسلسل الحالات المنتجة عند درجات حرارة مختلفة، وشرح النتائج. وبناءً على الحل التام للنظام، فإننا نتوقع تمغنط النظام فقط عندما تؤوّل درجة الحرارة إلى الصفر (شبكة لا نهائية). هل تتفق نتائج حساباتك مع التنبؤات؟ كيف يعتمد حجم تجمع تقليدي على درجة الحرارة؟

(ب) عدّل البرنامج لحساب متوسط الطاقة على نحو ما هو في السؤال (27.8). ثم ارسم بيانيًا متوسط الطاقة والسعة الحرارية بوصفها دالة من درجة الحرارة، وقارن ذلك بالنتائج التامة لشبكة لا نهائية.

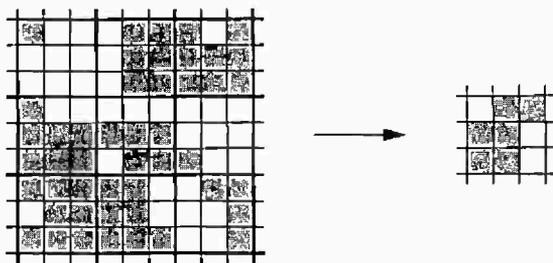
(ج) عدّل البرنامج لحساب المغنطة، على نحو ما تم في السؤال 28.8. وحدد المغنطة الأكثر احتمالاً عند درجات حرارة مختلفة، ثم ناقش النتائج.

السؤال 31.8: عدّل برنامج أيسنج لمحاكاة نموذج أيسنج بثلاثة أبعاد لشبكة على صورة مكعب بسيط. وبأي طريقة ممكنة، وحاول أن تبين أن لهذا النظام درجة حرارة حرجة بحدود $T = 4.5$.

السؤال 32.8: تخيل أخذ شبكة أيسنج ثنائية الأبعاد، وقسم المواقع إلى «وحدات بناء» 3×3 ، على نحو ما هو مبين في الشكل (11.8). وفي تحويل وحدة بناء الزخم المعزلي، تستبدل العزوم التسعة في كل وحدة بناء بعزم واحد تحدد حالته بقانسون الأغلبية الذي ينص على كون العزم الواحد الجديد يتجه إلى الأعلى، إذا كان أكثر من نصف العزوم الأصلية تتجه إلى الأعلى، وأن ذلك العزم سيوجه إلى الأسفل إذا كان أكثر من نصف العزوم الأصلية تتجه إلى الأسفل.

وبتطبيق هذا التحويل على الشبكة كلها، فإننا نصغرها إلى شبكة جديدة عرضها يساوي $1/3$ عرض الشبكة الأصلية. إن هذا التحويل هو صيغة من صيغ تحويل إعادة تسوية المجموعة، وهي تقنية عالية الكفاءة لدراسة تصرف الأنظمة قريبًا من نقاطها الحرجة⁽⁹⁰⁾.

(90) لمعلومات أكثر عن مجموعات إعادة التسوية وتطبيقاتها انظر



الشكل 11.8: في تحويل وحدة بناء الزخم المغزلي تُستبدل كل وحدة بناء ذات تسعة عزوم، بعزم واحد، الذي يعتمد اصطفاؤه على قانون الأغلبية.

(أ) أضف برنامجاً فرعياً إلى برنامج أيسنج لتطبيق تحويل وحدة بناء الزخم المغزلي إلى الحالة الحالية للشبكة، وارسم الشبكة المحولة بجانب الشبكة الأصلية (اترك الشبكة الأصلية دون تغيير). اجعل البرنامج ينفذ هذا البرنامج الفرعي دورياً، بحيث يمكنك مشاهدة تطور الشبكتين.

(ب) شغّل برنامجك لشبكة أصلية بحجم 90×90 عند درجات حرارة مختلفة. وعندما يتزن النظام عند حالة تقليدية، لكل درجة حرارة، قارن الشبكة المحولة بجزء، حجمه 30×30 من الشبكة الأصلية. بوجه عام، ستلاحظ أن الشبكة المحولة تشبه شبكة أصلية عند درجات حرارة مختلفة. دعنا نسمي درجة الحرارة تلك درجة الحرارة المتحولة. فمتى تكون درجة الحرارة المتحولة أكبر من درجة الحرارة الأصلية، ومتى تكون أصغر؟

(ج) تخيل الابتداء بشبكة كبيرة جداً، ثم تطبيق عدد كبير من تحويلات وحدات بناء الزخم المغزلي المتتالية، كل مرة نأخذ النظام إلى درجة حرارة فعالة جديدة. ناقش كيف أنه مهما كانت درجة الحرارة الأصلية، فإن هذا المسلك في النهاية سيؤدي إلى واحدة من ثلاث درجات حرارة ثابتة: الصفر، أو اللانهاية، أو الدرجة الحرجة. فما درجة الحرارة الابتدائية التي ستؤدي إلى كل من تلك النقاط الثابتة؟ (فكر في تداعيات حقيقة أن درجة الحرارة الحرجة نقطة ثابتة لتحويل بناء وحدات الزخم المغزلي. وإذا كان أخذ المتوسط على حالة ذات مقياس صغير للنظام لا يغير في الديناميكا عليه، فإن كثيراً من تصرفات النظام يجب ألا تعتمد على أي تفاصيل مجهرية معينة. وهذا يعني أن الأنظمة الفيزيائية المختلفة (مغناطيس، مواع، وهكذا) يكون لها التصرف الحرج نفسه. وبتحديد أكثر، فإن هذه الأنظمة تأخذ الأسس الحرجة نفسها، مثل تلك التي عرفت في الأسئلة (55.5) و(24.8). لكن هناك عاملين يمكنهما التأثير في التصرف الحرج: أحدهما هو أبعاد الفضاء الذي يوجد فيه النظام (ثلاثي لمعظم الأنظمة الحقيقية). أما العامل الثاني فهو البعدية للمتجه الذي يعرف المغنطة (أو معامل الترتيب) للنظام. وفي نموذج أيسنج، فإن المغنطة أحادية البعد، دائماً في اتجاه أحد المحاور. في حين يكون عامل الترتيب للموائع كمية أحادية الأبعاد أيضاً، وهو الفرق في الكثافة بين السائل والغاز. وعليه، فإن تصرف الموائع بالقرب من نقاطها الحرجة يجب أن يكون تصرف نموذج أيسنج ثلاثي الأبعاد نفسه.