X1-176 (2023/11/23)

میدان- ِ-میانگین، و فرینه یِ انرژی-یِ-آزاد

محمد خرمی

mamwad@mailaps.org

تقریب ِ میدان- ِ-میانگین این است: در محاسبه یِ وزن- ِ-بُلتسمان [1]، در هَمیلتنی، از جملات ِ با درجه-یِ-بیش-از-یک ِ انحراف-از-میانگین چشم-پوشی میشود؛ با وزن- ِ-بُلتسمان [1] ِ حاصل، که تابع ِ میانگین است، میانگین حساب میشود و با میانگین ی که در وزن- ِ-بُلتسمان [1]وارد شده بود برابر گذاشته میشود. این یک معادله یِ خُد-سازگاری برا یِ میانگین است.

به جا یِ معادله یِ خُد-سازگاری، میشود تابع- ِ-پارش و در نتیجه انرژی-یِ-آزاد را بر حسب ِ میانگین حساب کرد، و شرط ِ حاکم بر میانگین را این گذاشت که انرژی-یِ-آزاد فرینه شود.

ارتباط ِ این دُ-رهییافت با هم بررسی میشود.

0 درامد

یک سیستم ِ آماری با یک چشمه به دما یِ T در تعادل ِ گرمایی ست. β چنین تعریف میشود.

$$\beta = \frac{1}{k_{\mathrm{B}}\,T}. \tag{1}$$

$k_{\rm B}$ ثابت ِ بُلتسمان [1] است. چگالی-یِ-احتمال ِ این که سیستم در حالت ِ x باشد $\rho(x)$ است:

$$\rho(x) = Z^{-1}\,\mathsf{B}(x). \tag{2}$$

که B وزن- ِ-بُلتسمان [1] و Z تابع- ِ-پارش است:

$$\mathsf{B}(x) = \exp[-\beta\, H(x)]. \tag{3}$$

$$Z = \int (\mathrm{d}\,V)\,\mathsf{B}. \tag{4}$$

$H(x)$ انرژی یِ حالت ِ x است، و $(\mathrm{d}\,V)$ عنصر- ِ-حجم است. به این ترتیب، اگر $\mathfrak{F}$ یک تابع ِ حالت باشد،

$$\langle\mathfrak{F}\rangle = Z^{-1}\,\int (\mathrm{d}\,V)\,\mathsf{B}\,\mathfrak{F}. \tag{5}$$

که $\langle\mathfrak{F}\rangle$ میانگین ِ (مقدار- ِ-چشمداشتی یِ) $\mathfrak{F}$ است. از جمله،

$$\langle x^i\rangle = Z^{-1}\,\int (\mathrm{d}\,V)\,\mathsf{B}\,x^i. \tag{6}$$

که x^i مختصه یِ i ِ حالت است. انرژی-یِ-آزاد (ِ هِلمهُلتس [2]) را با F نشان میدهم:

$$-\beta\,F = \ln Z. \tag{7}$$

اینها را (نَ لزومَن با هم ین نماد-گذاری) میشود در مثلَن [3] یافت.

این که چگالی-یِ-احتمال به کار رفته (و نَ احتمال)، و انتگرال-گیری به کار رفته (و نَ جمع-بندی) مسئله را به حالتها یِ پیوسته خاص نمیکند. آن چه به دست خاهد آمد را میشود برا یِ حالتها یِ گسسته هم به کار برد. برا یِ حالتها یِ گسسته،

$$\mathrm{d}\,V = \sum_a (\mathrm{d}\,\tilde{V})\,\delta(\centerdot, x_a). \tag{8}$$

که حالتها با شاخص ِ گسسته (a) مشخص شده اند و δ دلتا یِ دیرَک [4] است:

$$\int (\mathrm{d}\,\tilde{V})\,\delta(\centerdot, \mathfrak{y})\,\mathfrak{F} = \mathfrak{F}(\mathfrak{y}). \tag{9}$$

دیده میشود وقت ی حالتها گسسته اند،

$$Z = \sum_a \mathsf{B}(x_a). \tag{10}$$

$$\langle \mathfrak{F} \rangle = \sum_a P_a\, \mathfrak{F}(x_a). \tag{11}$$

که،

$$P_a = Z^{-1} \mathsf{B}(x_a). \tag{12}$$

1 میدان ِ میانگین

مشتق-گیری (نسبت به متغیر ِ اول، اگر تابع چند-متغیره باشد) را با پریم نشان میدهم:

$$\mathfrak{X}'_i(\centerdot, \mathfrak{x}) = (\mathrm{D}_i\, \mathfrak{X})(\centerdot, \mathfrak{x}). \tag{13}$$

تقریب ِ میدان- ِ-میانگین این است. H (تابع ِ انرژی) با H_1 (بسط- ِ-تیلِر [4] ِ آن حوٌل ِ میانگین تا مرتبه ی ِ یک) جایگزین میشود:

$$H_1(m, x) = H(m) + [H'_i(m)]\,(x^i - m^i). \tag{14}$$

که m^i میانگین ِ x^i است.

وزن- ِ-بُلتسمان [1]، تابع- ِ-پارش، چگالی-ی ِ-احتمال، و مقدار- ِ-چشمداشتی ی ِ x^i ها، با این انرژی-ی ِ-خطی-شده حساب میشوند:

$$\mathsf{B}_1 = \exp(-\beta\, H_1). \tag{15}$$

$$Z_1 = \int (\mathrm{d}\, V)\, \mathsf{B}_1. \tag{16}$$

$$\rho_1 = (Z_1)^{-1}\, \mathsf{B}_1. \tag{17}$$

$$\langle x^i \rangle_1 = (Z_1)^{-1} \int (\mathrm{d}\, V)\, \mathsf{B}_1\, x^i. \tag{18}$$

شاخص ِ 1 نشانه یِ تقریب ِ به-کار-رفته است.

مفصلتر ِ روابط ِ (15) تا (18) چنین است.

$$\mathsf{B}_1(m, x) = \exp[-\beta\, H_1(m, x)]. \tag{19}$$

$$Z_1(m) = \int (\mathrm{d}\, V)\, \mathsf{B}_1(m, \bullet). \tag{20}$$

$$\rho_1(m, x) = [Z_1(m)]^{-1}\, \mathsf{B}_1(m, x). \tag{21}$$

$$\langle x^i \rangle_1(m) = [Z_1(m)]^{-1} \int (\mathrm{d}\, V)\, [\mathsf{B}_1(m, \bullet)]\, x^i. \tag{22}$$

m در تقریب ِ میدان- ِ-میانگین را با m_1 نشان میدهم. m_1 جواب ِ این معادله یِ خُد-سازگاری ست.

$$m_1^i = \langle x^i \rangle_1(m_1). \tag{23}$$

این را میشود چنین نوشت.

$$0 = X_1^i(m_1). \tag{24}$$

که،

$$X_1^i = \langle x^i \rangle_1 - m^i. \tag{25}$$

2 انرژی-یِ-آزاد ِ هِلمهُلتس با میدان- ِ-میانگین

انرژی-یِ-آزاد ِ هِلمهُلتس [2] در تقریب ِ میدان- ِ-میانگین را با F_1 نشان میدهم:

$$-\beta\, F_1 = \ln Z_1. \tag{26}$$

مفصلتر،

$$-\beta\, F_1(m) = \ln[Z_1(m)]. \tag{27}$$

دیده میشود

$$F'_{1\,i}(m) = [Z_1(m)]^{-1} \int (\mathrm{d}\,V)\,(\mathsf{B}_1\,H'_{1\,i})(m, \cdot). \tag{28}$$

از (14) هم نتیجه میشود

$$H'_{1\,i}(m, x) = [H''_{i\,j}(m)]\,(x^j - m^j). \tag{29}$$

این را در (28) میگذارم:

$$F'_{1\,i} = H''_{i\,j}\,X_1^j \tag{30}$$

F_1 در $\tilde{m}_1$ فرینه میشود:

$$F'_{1\,i}(\tilde{m}_1) = 0. \tag{31}$$

3 همئرزی یِ تقریبها

از (24) و (30) نتیجه میشود

$$F'_{1\,i}(m_1) = 0. \tag{32}$$

این یعنی میانگین ی که معادله یِ خُد-سازگاری یِ تقریب ِ میدان- ِ-میانگین را برمیئاورد، انرژی-یِ-آزاد ِ تقریبی را فرینه میکند. از (30) و (31) هم دیده میشود

$$0 = [H''_{i\,j}(\tilde{m}_1)]\,X_1^j(\tilde{m}_1). \tag{33}$$

پس اگر $[H''(\tilde{m}_1)]$ ناتکین باشد، $\tilde{m}_1$ معادله یِ خُد-سازگاری یِ تقریب ِ میدان- ِ-میانگین را برمیئاورد: میانگین ی که انرژی-یِ-آزاد ِ تقریبی را فرینه میکند معادله یِ خُد-سازگاری یِ تقریب ِ میدان- ِ-میانگین را برمیئاورد، اگر H'' در این میانگین ناتکین باشد. اینها یعنی فرینه-شدن ِ انرژی-یِ-آزاد ِ تقریبی، با براورده-شدن ِ معادله-یِ-خُدسازگاری یِ تقریب ِ میدان- ِ-میانگین همئرز است، اگر H'' ناتکین باشد.

4 پانوشتها

[1] Boltzmann

[2] Helmholtz

[3] R. K. Pathria & Paul D. Beale; “Statistical mechanics” 3rd edition (Elsevier, 2013)

[4] Taylor