

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده‌ی فیزیک

## مطالعه‌ی مدل‌های مغناطیسی بر روی شبکه‌های براوه و غیربراهه به روش خودسازگار گاوسی

پایان‌نامه‌ی کارشناسی ارشد فیزیک، گرایش ماده‌ی چگال

نفیسه رحیمی‌پور

استاد راهنما  
دکتر فرهاد شهبازی



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک ماده چگال خانم نفیسه رحیمی پور  
تحت عنوان

مطالعه مدل‌های مغناطیسی بر روی شبکه‌های براوه و غیربراهه به  
روش خودسازگار گاوسی

در تاریخ ۱۳۹۳/۰۸/۲۶ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

دکتر فرهاد شهبازی

۱- استاد راهنما پایان نامه

دکتر کیوان آقابابایی سامانی

۲- استاد مشاور پایان نامه

دکتر فرهاد فضیله

۳- استاد داور

دکتر مجتبی اعلائی

۴- استاد داور

دکتر فرهاد شهبازی

سرپرست تحصیلات تکمیلی دانشکده فیزیک

کلیه حقوق مادی مترتب بر نتایج مطالعات،  
ابتکارات و نوآوری‌های ناشی از تحقیق  
موضوع این پایان‌نامه متعلق به دانشگاه  
صنعتی اصفهان است.

# فهرست مطالب

۱	چکیده
۲	۱ مفاهیم پایه در سیستم‌های مغناطیسی
۲	۱.۱ مقدمه
۴	۲.۱ مدل‌های مغناطیسی
۴	۱.۲.۱ مدل آیزینگ
۵	۲.۲.۱ مدل همسانگرد $XY$
۵	۳.۲.۱ مدل همسانگرد هایزنبرگ
۶	۴.۲.۱ مدل $XXZ$
۶	۳.۱ پذیرفتاری مغناطیسی
۹	۴.۱ نماهای بحرانی
۱۱	۵.۱ ناکامی
۱۲	۱.۵.۱ ناکامی هندسی
۱۳	۲.۵.۱ ناکامی ناشی از برهم‌کنش‌های رقابتی
۱۷	۶.۱ اثرات تجربی ناکامی
۱۹	۷.۱ آشنایی با چند ماده‌ی ناکام مغناطیسی
۲۳	۸.۱ جمع بندی
۲۴	۲ آشنایی با برخی روش‌های مطالعه‌ی مدل‌های مغناطیسی
۲۵	۱.۲ روش لاتینجر- تیزا
۲۷	۲.۲ روش خودسازگار گاوسی (SCGA)
۳۰	۱.۲.۲ حل معادله‌ی خودسازگار
۳۰	۲.۲.۲ تابع هم‌بستگی اسپینی
۳۱	۳.۲.۲ کمیت‌های ترمودینامیکی
۳۲	۳.۲ جمع بندی
۳۳	۳ بررسی شبکه‌های براوه به روش خودسازگار گاوسی
۳۴	۱.۳ شبکه‌ی مربعی
۳۷	۱.۱.۳ محاسبه‌ی دمای بحرانی
۳۸	۲.۱.۳ محاسبه‌ی نمای بحرانی $\gamma$
۳۹	۳.۱.۳ انرژی درونی
۳۹	۲.۳ شبکه‌ی مکعبی ساده
۴۰	۱.۲.۳ مدل آیزینگ بر روی شبکه‌ی مکعبی ساده
۴۳	۲.۲.۳ مدل همسانگرد هایزنبرگ بر روی شبکه‌ی مکعبی ساده

۴۷	.....	جمع بندی	۳.۳
۴۸	.....	مطالعه‌ی اثر ناکامی در شبکه‌های غیر براوه	۴
۴۹	.....	شبکه‌ی لانه زنبوری	۱.۴
۵۲	.....	به‌کارگیری روش لاتینجر-تیزا	۱.۱.۴
۵۵	.....	روش خودسازگار گاوسی بر روی شبکه‌ی لانه زنبوری	۲.۱.۴
۶۰	.....	شبکه‌ی الماسی	۲.۴
۶۵	.....	روش لاتینجر-تیزا	۱.۲.۴
۷۰	.....	حل معادله‌ی خودسازگار گاوسی برای شبکه‌ی الماسی	۲.۲.۴
۷۱	.....	تابع ساختار شبکه‌ی الماسی	۳.۲.۴
۷۳	.....	جمع بندی	۳.۴
۷۴	.....	نتیجه‌گیری	۵
۷۷	.....	مراجع	

## چکیده

سیستم‌های هم‌بسته‌ی قوی مغناطیسی به دلیل ویژگی‌های جالب توجه‌شان، در سال‌های اخیر بسیار مورد توجه قرار گرفته‌اند. اما پیچیدگی‌های موجود در چنین سیستم‌هایی باعث عدم دست‌یابی به شناخت کاملی از خصوصیات جالب آن‌ها شده است. یکی از این ویژگی‌های جالب ظهور پدیده‌ی ناکامی است. یک ماده‌ی ناکام مغناطیسی تا دماهای بسیار پایین‌تر از دمای کوری وایس نامنظم می‌ماند. حالت پایه‌ی چنین سیستمی دارای تبهگنی ماکروسکوپی بوده و این حالت پایه‌ی تبهگن نسبت به هر گونه اختلالی بسیار حساس است. در این پایان‌نامه با تمرکز بر روی سیستم‌های ناکام، با به‌کارگیری مدل‌های مغناطیسی، شبکه‌های براوه و غیربراهه را مورد بررسی قرار می‌دهیم. به عنوان اولین گام جهت مدل‌سازی سیستم‌های ناکام مغناطیسی، مدل‌های کلاسیکی آیزینگ و هایزنبرگ را معرفی می‌کنیم. در ادامه انواع ناکامی را برشمرده و به بحث درباره‌ی اثرات تجربی ناکامی می‌پردازیم. پس از آن روش‌های به‌کار برده شده در این پایان‌نامه را به‌طور کامل شرح می‌دهیم. روش لاتینجر-تیزا برای یافتن پیکربندی بردار موج‌های منظمی که به ازای مقادیر مختلفی از شدت برهم‌کنش‌ها، پایین‌ترین حالت انرژی را مشخص می‌کنند، به کار می‌رود. در روش خودسازگار گاؤسی رفتارهای جمعی یک سیستم مغناطیسی با به‌کارگیری مدل‌های مغناطیسی مورد مطالعه قرار می‌گیرد. از آنجایی که تابع پارش دربرگیرنده‌ی اطلاعات ترمودینامیکی هر سیستمی است، در این روش تابع پارش و سپس تابع هم‌بستگی را محاسبه می‌کنیم. اما کمیت مفید دیگر تابع ساختار است که از مجموع تمام هم‌بستگی‌ها حاصل می‌شود.

شبکه‌های مربعی و مکعبی ساده شبکه‌هایی هستند که در این پایان‌نامه به عنوان نمونه‌هایی از شبکه‌های براوه با روش خودسازگار گاؤسی مورد مطالعه قرار می‌گیرند. در ابتدا با به‌کارگیری مدل آیزینگ بر روی این شبکه‌ها مقدار ثابت خودسازگار گاؤسی را به دست می‌آوریم. دمای گذار و نمای بحرانی پذیرفتاری مغناطیسی به ترتیب با رسم معکوس تابع پذیرفتاری مغناطیسی و تابع لگاریتمی پذیرفتاری قابل محاسبه‌اند. اما از آنجا که مدل آیزینگ دوبعدی توسط انزاگر به طور دقیق حل شده، با مقایسه‌ی مقادیر محاسبه شده از روش خودسازگار گاؤسی با نتایج حل دقیق می‌توان در مورد توانایی این روش برای محاسبه‌ی دمای بحرانی و نمای بحرانی  $\gamma$  قضاوت کرد. در ادامه مدل هایزنبرگ را بر روی شبکه‌ی مکعبی ساده به کار می‌گیریم. در این جا نیز با محاسبه‌ی تابع هم‌بستگی و پذیرفتاری مغناطیسی می‌توانیم مقایسه‌ای میان نتایج حاصل از این روش و مقادیر حاصل از روش مونت کارلو داشته باشیم. به منظور مطالعه‌ی مدل  $T_1 - T_2$  هایزنبرگ بر روی شبکه‌های لانه زنبوری و الماسی، در ادامه، روش‌های لاتینجر-تیزا و خودسازگار گاؤسی به کار گرفته می‌شوند. این مدل بر روی شبکه‌های دوبخشی نظم نل نشان می‌دهد. حال اگر برهم‌کنش‌های پادفرومغناطیس بین همسایه‌های دوم نسبت به برهم‌کنش‌های پادفرومغناطیس همسایه اول افزایش یابد، اثر ناکامی پدیدار می‌شود. در چنین شرایطی فازهای جدیدی همچون فازهای منظم سطحی، دارای نظم مارپیچ‌گونه و یا مایع اسپینی می‌توانند شکل بگیرند. در این جا فازهای مایع اسپینی نظیر مایع اسپینی حلقوی‌گونه و پن‌کیک‌گونه را در شبکه‌ی لانه زنبوری به دست می‌آوریم. هم‌چنین نشان می‌دهیم که در شبکه‌ی الماسی تبهگنی حالت پایه می‌تواند توسط افت و خیزهای دمایی از طریق مکانیسم نظم به واسطه‌ی بی‌نظمی برداشته شود. این پایان‌نامه را با بحث بر روی نتایج حاصل شده به انتها می‌رسانیم.

کلمات کلیدی:

ناکامی، مدل هایزنبرگ کلاسیکی، روش خودسازگار گاؤسی، مایع اسپینی، نظم به واسطه‌ی بی‌نظمی

# فصل ۱

## مفاهیم پایه در سیستم‌های مغناطیسی

### ۱.۱ مقدمه

سیستم‌های مغناطیسی هم‌بسته‌ی قوی دسته‌ای از مواد هستند که در آن‌ها برهم‌کنش‌های الکترون-الکترون بسیار قوی است به طوری که اثرات هم‌بستگی را نشان می‌دهند. بررسی رفتارهای این گونه مواد با توجه به کاربردهای فراوان و ویژگی‌های متفاوتی که نشان می‌دهند، مهم و تأثیرگذار است، به ویژه زمانی که از دیدگاه تجربی شاهد وقوع رفتارهای غیرعادی در این دسته مواد باشیم. رفتارهای غیر معمولی که گاه شکل‌گیری فازهای شگفت‌آوری را در ماده ممکن می‌سازند و موجب ایجاد پیچیدگی‌هایی در بررسی این دسته از سیستم‌ها می‌شوند. در این فصل با انگیزه‌ی ایجاد درک عمیق نسبت به سیستم‌های مغناطیسی، ابتدا به معرفی مفاهیم کلی و پرکاربرد در مطالعه‌ی این گونه ساختارها می‌پردازیم و در ادامه بر روی ویژگی جنجال‌برانگیز مشاهده شده در این سیستم‌ها، یعنی پیدایش ناکامی<sup>۱</sup> مغناطیسی و ظهور فاز مایع اسپینی<sup>۲</sup> به طور خاص متمرکز می‌شویم. مهم‌ترین مشخصه‌ی اغلب مواد مغناطیسی، وقوع گذار فاز در سیستم و رسیدن به نوعی نظم بلند برد است. انواع فازهای مغناطیسی را همان‌طور که در شکل ۱.۱ نشان داده شده است به صورت زیر خلاصه می‌کنیم:

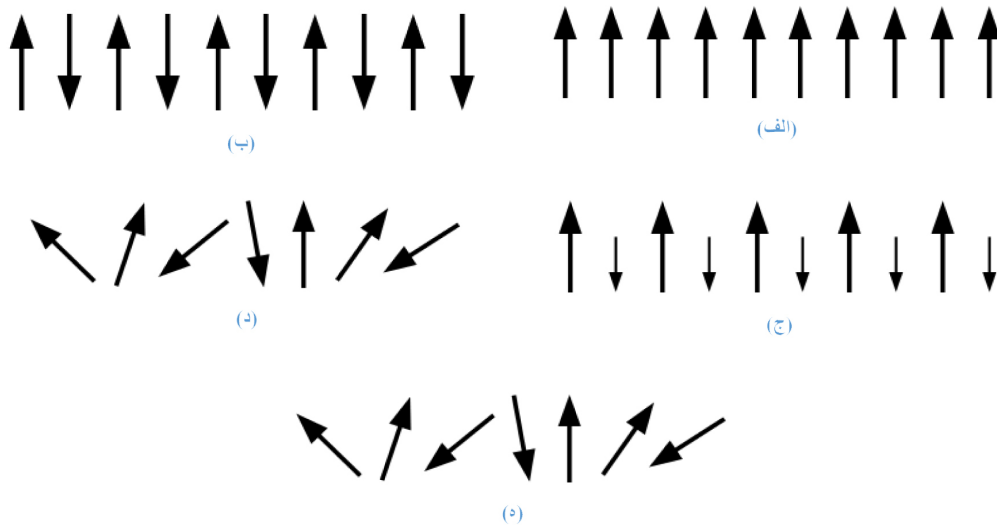
الف- نظم فرومغناطیس: در این حالت گشتاورهای مغناطیسی اسپینی به صورت موازی و هم‌جهت قرار گرفته‌اند و بنابراین مغناطش کل سیستم غیر صفر خواهد بود.

---

<sup>۱</sup> Frustration

<sup>۲</sup> Spin liquid





شکل ۱.۱: انواع فازهای مغناطیسی: (الف): نظم فرومغناطیس، (ب): نظم پادفرومغناطیس، (ج): نظم فری مغناطیس، (د): پارامغناطیس، (ه): شیشه‌ی اسپینی.

ب- نظم پادفرومغناطیس: سیستمی که دارای چنین نظمی باشد، گشتاورهای اسپینی‌اش را به صورت پادموازی مرتب می‌کند. این گونه از نظم بر روی شبکه‌های دوبخشی<sup>۳</sup> که از دو زیر شبکه‌ی کاملاً همسان تشکیل شده‌اند، شکل می‌گیرد.

ج- نظم فری مغناطیس: اگر گشتاورهای مغناطیسی اسپینی به صورت پادموازی قرار گیرند اما اندازه‌ی آن‌ها در جهت‌های مختلف یکسان نباشد، شاهد ظهور نظم فری مغناطیس خواهیم بود. در این حالت مغناطش کل غیر صفر است.

د- فاز پارامغناطیس: هنگامی که گشتاورهای اسپینی افت و خیز دارند و در زمان‌های مختلف جهت‌گیری‌های کاملاً تصادفی دارند، شکل‌گیری فاز پارامغناطیس امکان‌پذیر است. واضح است که در این شرایط برای یک سیستم متشکل از تعداد بی‌شماری اسپین، مغناطش میانگین کل سیستم برابر صفر خواهد بود. در این حالت برهم‌کنش‌ها کوتاه بردند و هم‌بستگی وجود ندارد.

ه- فاز شیشه‌ی اسپینی<sup>۴</sup>: گونه‌ای دیگر از فاز مغناطیسی به این صورت است که جهت‌گیری

<sup>۳</sup> Bipartite

<sup>۴</sup> Spin glass

اسپین‌ها کاملاً بی‌نظم و یخ زده است و تفاوت آن با فاز پارامغناطیس وجود هم‌بستگی غیر صفر و عدم آزادی افت و خیز برای گشتاورهای مغناطیسی در حالت شیشه‌ی اسپینی است.

## ۲.۱ مدل‌های مغناطیسی

الکترون‌ها به دلیل باردار بودن و حرکت مداری‌شان دارای گشتاور مغناطیسی مداری هستند. هم‌چنین داشتن گشتاور اسپینی ذاتی، الکترون‌ها را یکی از عوامل ایجاد خاصیت مغناطیسی در بیشتر مواد معرفی می‌کند [۱]. هر سیستم مغناطیسی متشکل از تعداد زیادی یون و بنابر این تعداد بسیار زیادی الکترون می‌باشد. در نظر گرفتن برهم‌کنش این یون‌ها با یون‌های مجاور، خود گویای ظهور رفتارهای پیچیده‌ی جمعی<sup>۵</sup> است. این ویژگی درک این نکته را که بررسی چنین سیستمی با این همه پیچیدگی کاری بس دشوار است را ساده می‌کند.

اما به راستی راه حل چیست؟ آیا دستیابی به فیزیک چنین سیستم پیچیده‌ای غیرممکن است؟ پاسخ این است که مدل‌سازی می‌تواند در چنین شرایطی کارگشا باشد. هرچند که گاه بخشی از فیزیک سیستم تحت این مدل‌سازی‌ها دور ریخته می‌شود، اما به یقین کاربردهای فراوانی که این ساده‌سازی‌ها در پیدایش درک عمیقی از سیستم مورد مطالعه دارد، انگیزه‌ای کافی برای به‌کارگیری این مدل‌ها ایجاد خواهد کرد. مدل‌هایی که مناسب سیستم‌های مغناطیسی هستند معمولاً تنها درجات آزادی اسپینی را وارد می‌کنند چرا که در این سیستم‌ها الکترون‌ها جای‌گزیده‌اند و بنابراین افت و خیز بار وجود ندارد و فقط درجه‌ی آزادی اسپینی باقی می‌ماند. در این قسمت به معرفی چند مدل ساده اما پرکاربرد که در این پایان‌نامه استفاده شده است، بسنده می‌کنیم.

### ۱.۲.۱ مدل آیزینگ

ساده‌ترین مدل ارائه شده در مطالعه‌ی سیستم‌های اسپینی، مدل آیزینگ<sup>۶</sup> است. در این مدل، درجات آزادی، اسپین‌های آیزینگ هستند که تنها می‌توانند مقادیر +۱ و -۱ را اختیار کنند. هامیلتونی مناسب در این مدل به شکل زیر بیان می‌شود:

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \sigma_i \sigma_j \quad (1.1)$$

<sup>۵</sup>Collective behavior

<sup>۶</sup>Ising model

در این رابطه  $\sigma_i$  معرف اسپین نقطه‌ی  $i$  ام شبکه است و  $J_{ij}$  ها درایه‌های ماتریس جفت‌شدگی<sup>۷</sup> برهم‌کنش‌های بین نقاط مختلف شبکه هستند که در راستاهای مختلف یکسان در نظر گرفته می‌شوند و برهم‌کنش‌های همسانگرد نامیده می‌شوند [۲]. این مدل در یک و دو بعد حل دقیق دارد [۳]. در یک بعد این مدل هیچ‌گونه گذار فاز دمای محدود را نشان نمی‌دهد اما در دو بعد اطلاعاتی درباره‌ی خواص نقطه‌ی بحرانی، که جداکننده‌ی فازهای منظم و بی‌نظم است، ارایه می‌دهد.

### ۲.۲.۱ مدل همسانگرد $XY$

چنانچه اسپین‌ها را در صفحه‌ی  $xy$  در نظر بگیریم مدل مطلوب  $XY$  خواهد بود. در این شرایط اسپین‌ها آزادی چرخش در صفحه را خواهند داشت و بنابراین در هامیلتونی این مدل تنها مؤلفه‌های  $x$  و  $y$  اسپین‌ها مورد انتظارند.

$$H_{XY} = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (۲.۱)$$

### ۳.۲.۱ مدل همسانگرد هایزنبرگ

با توجه به محدودیت‌های مطرح شده در مدل‌های آیزینگ و  $XY$  بر روی درجات آزادی اسپینی، واضح است که این مدل‌ها توانایی کافی برای بررسی همه‌ی سیستم‌های مغناطیسی را ندارند. بنابراین مدل کامل‌تری به نام مدل هایزنبرگ<sup>۸</sup> مطرح می‌شود که در آن اسپین‌ها درجات آزادی  $x, y, z$  را دارا می‌باشند. هامیلتونی مطلوب برای چنین مدلی به صورت زیر خواهد بود:

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (۳.۱)$$

لازم به ذکر است که در مدل همسانگرد هایزنبرگ، جفت‌شدگی‌ها در راستاهای مختلف یکسان در نظر گرفته می‌شوند.

---

<sup>۷</sup>Coupling

<sup>۸</sup>Heisenberg model

### ۴.۲.۱ مدل $XXZ$

در این مدل جفت‌شدگی برهم‌کنش‌ها در راستای  $z$  نسبت به راستاهای  $x$  و  $y$  متفاوت در نظر گرفته می‌شود، بنابراین هامیلتونی مورد انتظار در چنین سیستمی به صورت

$$H = \sum_{ij} J_{ij} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + \Delta S_i^z S_j^z) \quad (۴.۱)$$

خواهد بود [۴]. در این رابطه  $\Delta$  را پارامتر ناهمسانگردی می‌نامیم که می‌تواند در بازه‌ی [۰, ۱] متغیر باشد.

روشن است که  $\Delta = ۱$  مبین مدل همسانگرد هایزنبرگ بوده و  $\Delta = ۰$  با مدل همسانگرد  $XY$  تطابق دارد.

### ۳.۱ پذیرفتاری مغناطیسی

یکی از توابع پاسخی که در بررسی سیستم‌های مغناطیسی اهمیت ویژه‌ای دارد، تابع پذیرفتاری<sup>۹</sup> مغناطیسی است. پذیرفتاری مغناطیسی خاصیتی بنیادی در مواد است که اندازه‌گیری آن متضمن اطلاعات زیادی از ساختار الکترونی و وجود حالت‌های مغناطیسی منظم در ماده است و با تغییرات خطی مغناطش کل هنگامی که میدان مغناطیسی خارجی در راستای فرضی  $z$  اعمال می‌شود رابطه‌ی مستقیم دارد و به صورت زیر بیان می‌شود:

$$\chi = \frac{1}{N} \frac{\partial m}{\partial h} \quad (۵.۱)$$

که در این رابطه

$$m = \langle \sum_i \vec{S}_i^z \rangle. \quad (۶.۱)$$

با وارد کردن اثر میدان مغناطیسی، هامیلتونی هایزنبرگ به شکل زیر بازنویسی می‌شود.

$$H = \frac{1}{\gamma} \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (۷.۱)$$

<sup>۹</sup>Susceptibility

و بنابراین تابع پارش<sup>۱۰</sup> به صورت

$$Z = Tr[e^{-\beta \frac{J}{V} \sum_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j + \beta \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i}] \quad (۸.۱)$$

حاصل می‌شود.

از طرفی با به کارگیری تابع وزن بولتزن می‌توان به سادگی روابط زیر را به دست آورد.

$$\begin{aligned} \sum_i \langle S_i^z \rangle &= \frac{1}{Z} Tr(\sum_i S_i^z \exp^{-\beta H}) = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \\ \sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle &= \frac{1}{Z} Tr(\sum_{ij} S_i^z S_j^z \exp^{-\beta H}) = \frac{1}{\beta^2 Z} \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} \end{aligned} \quad (۹.۱)$$

و بنابراین رابطه‌ای کلی برای محاسبه‌ی پذیرفتاری مغناطیسی به دست می‌آید.

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \frac{1}{N\beta} \frac{\partial (\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h})}{\partial h} \\ &= \frac{1}{N\beta} \left[ \frac{1}{Z} \left( \frac{\partial^2 Z}{\partial h^2} \right) - \frac{1}{Z^2} \left( \frac{\partial Z}{\partial h} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{NT} \left[ \sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle - \left( \sum_i \langle S_i^z \rangle \right)^2 \right] \end{aligned} \quad (۱۰.۱)$$

در دماهای بالا می‌توان نشان داد که پذیرفتاری مغناطیسی با تابع همبستگی رابطه‌ای مستقیم به شکل زیر دارد.

$$\begin{aligned} \chi(T) &= \frac{1}{N} \langle \left( \sum_i S_i^z \right)^2 \rangle \\ &= \frac{1}{NT} \left[ \sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle \right] \end{aligned} \quad (۱۱.۱)$$

در این رابطه (...) میانگین دمایی است. اما از آنجا که در دماهای بالا اسپین‌ها از هم مستقل هستند و همچنین با فرض همسانگرد بودن اسپین‌ها می‌توان رابطه‌ی همبستگی را به صورت

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{1}{3} S(S+1) \delta_{ij} \quad (۱۲.۱)$$

به دست آورد. در این رابطه  $S(S+1)$  از میانگین کل  $S^2$  حاصل شده است.

در ادامه با بسط این میانگین گرمایی در دماهای بالا و با به کارگیری تابع وزن بولتزن، رابطه‌ی

<sup>۱۰</sup> Partition Function

همبستگی در دماهای بالا به دست می‌آید.

$$\begin{aligned}\langle S_i^z S_j^z \rangle &= \frac{\text{Tr}(S_i^z S_j^z e^{-\beta H})}{\text{Tr}(e^{-\beta H})} \\ &= \frac{\text{Tr}(S_i^z S_j^z) + \text{Tr}(-\beta S_i^z S_j^z H)}{\text{Tr}(1) + \text{Tr}(-\beta H)} \\ &= \frac{\frac{1}{3}S(S+1) - \beta \langle S_i^z S_j^z H \rangle_0}{1 - \beta \langle H \rangle_0}\end{aligned}\quad (13.1)$$

اما با توجه به این که تمام نقاط شبکه در دماهای نامحدود مستقل‌اند، هامیلتونی فقط جفت‌شدگی جای‌گاه‌های مختلف را شامل می‌شود. پس با وارد کردن سهم مربوط به توان اول  $\beta$  معادله‌ی همبستگی‌ها به صورت زیر خلاصه می‌شود.

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \simeq \frac{1}{3}S(S+1) - \beta \left[ \frac{1}{4} J_{ij} \langle S_i^z S_j^z \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \rangle + \frac{1}{4} J_{ij} \langle S_i^z S_j^z \vec{S}_j \cdot \vec{S}_i \rangle \right] \quad (14.1)$$

از طرف دیگر با توجه به عدم همبستگی مؤلفه‌های مختلف اسپینی، با بسط مرتبه اول تابع همبستگی می‌توان نوشت:

$$\frac{1}{3}S(S+1) [\delta_{ij} - \frac{1}{3}S(S+1)\beta J_{ij} + O((\beta J)^2)] \quad (15.1)$$

با جای‌گذاری این رابطه در معادله‌ی (۱۱.۱)، رابطه‌ی پذیرفتاری با دما در دماهای بالا که آن را قانون کوری-وایس<sup>۱۱</sup> می‌نامیم حاصل می‌شود.

$$\chi(T) = \frac{1}{T} \frac{S(S+1)}{3} \left[ 1 - \frac{\theta}{T} + O\left(\frac{\theta}{T}\right)^2 \right] \quad (16.1)$$

در این معادله برابری‌های زیر را داریم.

$$\theta = \frac{1}{3}S(S+1)J_0; \quad J_0 = \frac{1}{N} \sum_{ij} J_{ij} \quad (17.1)$$

در این جا  $J_0$  به صورت میانگین جفت‌شدگی برهم‌کنش‌ها در نظر گرفته می‌شود. بنابراین رابطه‌ی تابع عکس پذیرفتاری به شکل زیر به دست می‌آید.

$$\chi^{-1}(T) = \left( \frac{S(S+1)}{3} \right)^{-1} (T + \theta + \dots) \quad (18.1)$$

<sup>۱۱</sup>Curie-Weiss

با برون یابی نمودار عکس پذیرفتاری، می توان دمای کوری وایس را مشخص کرد که با داشتن این کمیت محاسبه ی شدت و علامت برهم کنش های اسپینی امکان پذیر می شود. در حالت کلی مقدار منفی  $\theta_{CW}$  نمایانگر برهم کنش های پادرومغناطیس و مقدار مثبت آن حاکی از وجود برهم کنش های فرومغناطیس است [۱].

## ۴.۱ نماهای بحرانی

در تجربه، آنچه مشاهده پذیر است نوع رفتار توابع پاسخ ترمودینامیکی از قبیل پذیرفتاری مغناطیسی و ظرفیت گرمایی نسبت به دما است. به طور کلی رفتار این کمیت ها در نزدیکی دمای بحرانی به وسیله ی نماهای بحرانی<sup>۱۲</sup> مشخص می شود. اگر گذار فاز در دمای  $T_c$  رخ دهد، رفتار کمیت فیزیکی  $f$  در نزدیکی دمای بحرانی به صورت تابعی توانی از  $t$  خواهد بود که  $t$  را دمای کاهش یافته می نامیم و به صورت

$$t = \frac{T - T_c}{T_c} \quad (19.1)$$

تعریف می کنیم که در نقطه ی گذار برابر صفر می شود. حال نمای بحرانی  $k$  به شکل زیر قابل تعریف است:

$$k = \lim_{t \rightarrow 0} \frac{\log |f(t)|}{\log |t|} \quad (20.1)$$

بنابراین می توان نوشت:

$$f(t) \propto t^k \quad ; t \approx 0 \quad (21.1)$$

در مجموع چهار نمای بحرانی  $\alpha, \beta, \gamma$  و  $\nu$  تعریف می کنیم که روابط هر کدام در ادامه بیان می شوند. نمای بحرانی  $\beta$  معرف رفتار توانی مغناطش سیستم است. در یک سیستم مغناطیسی پارامتر نظم به

---

<sup>۱۲</sup>Critical exponents

صورت زیر تعریف می‌شود:

$$m(T) = \frac{1}{V} \lim_{h \rightarrow 0^+} M(h, T) \quad (22.1)$$

در شرایطی که میدان مغناطیسی خارجی صفر باشد پارامتر نظم نیز برای یک ماده‌ی پارامغناطیس صفر است. اما برای یک ماده با برهم‌کنش‌های فرومغناطیس در نزدیکی نقطه‌ی گذار پارامتر نظم به شکل زیر نسبت به دما متغیر است.

$$m(T, h = 0) \propto \begin{cases} 0 & T > T_c \\ |t|^\beta & T < T_c \end{cases} \quad (23.1)$$

از طرف دیگر وابستگی پاسخ سیستم به میدان مغناطیسی اعمال شده به آن نسبت به دما توسط نمای بحرانی  $\gamma$  مشخص می‌شود.

$$\chi_{\pm}(T, h = 0) \propto |t|^{-\gamma_{\pm}} \quad (24.1)$$

تابع پاسخ دیگری که بررسی می‌شود ظرفیت گرمایی است که تکینگی آن خود نوعی پاسخ گرمایی سیستم است و این رفتار با نمای بحرانی  $\alpha$  مشخص می‌شود.

$$C_{\pm}(T, h = 0) \propto |t|^{-\alpha_{\pm}} \quad (25.1)$$

نمای بحرانی  $\nu$  با طول هم‌بستگی مرتبط است. در نزدیکی دمای بحرانی، طول هم‌بستگی که معیاری از افت و خیز سیستم است به شکل زیر به دما وابسته است:

$$\xi_{\pm}(T, h = 0) \propto |t|^{-\nu_{\pm}} \quad (26.1)$$



از طرف دیگر رابطه‌ی تابع هم‌بستگی با فاصله بدین صورت است:

$$\Gamma(r) = r^{-(d-2+\eta)} e^{-\frac{r}{\xi}} \quad (27.1)$$

در این رابطه  $d$  بعد فضا و  $\eta$  بعد نابهنجار سیستم است. هر چه از نقطه‌ی بحرانی دور می‌شویم طول هم‌بستگی کوچک‌تر و بنابراین جمله‌ی نمایی غالب می‌شود. اما در نزدیکی دمای بحرانی طول هم‌بستگی به  $\infty$  میل می‌کند. بنابراین در مجاورت نقطه‌ی بحرانی تأثیر جمله‌ی نمایی ناچیز شده و رفتار تابع به صورت توانی خواهد بود. لازم به ذکر است که این نماهای بحرانی مستقل از هم نیستند.

## ۵.۱ ناکامی

معمولاً اغلب مواد مغناطیسی گذار فاز را تجربه می‌کنند و دست‌خوش شکل‌گیری نظم بلند برد می‌شوند. پیدایش نظم در سیستم نتیجه‌ی رقابت بین آنتروپی و انرژی درونی است. طبق رابطه‌ی انرژی آزاد که به صورت

$$F = U - TS \quad (28.1)$$

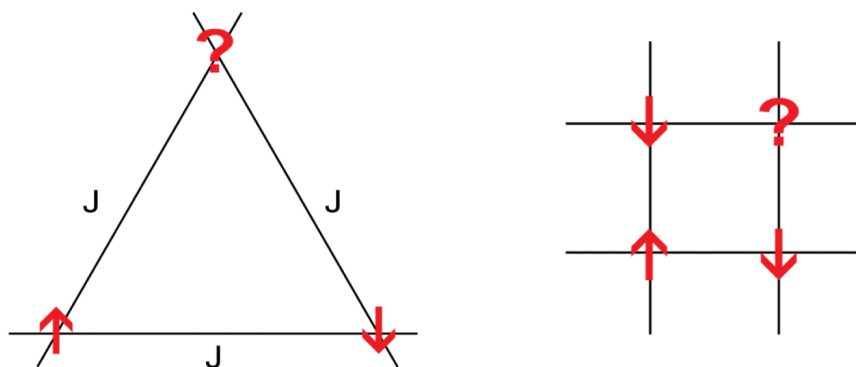
بیان می‌شود، در دماهای پایین، اثر انرژی غالب است و سیستم تلاش می‌کند با منظم شدن انرژی را پایین بیاورد. بنابر این  $F \propto U$ . در دماهای بالا اثر جمله‌ی آنتروپی غالب است و بنابر این بی‌نظمی پدیده‌ی غالب در چنین سیستمی خواهد بود.

اما گاه هر چه دما را پایین ببریم جمله‌ی انرژی نمی‌تواند تعیین‌کننده باشد و اثر آنتروپی هم‌چنان غالب است. در چنین شرایطی هیچ شکست تقارنی رخ نمی‌دهد و هیچ‌گونه نظم بلند بردی در سیستم شکل نمی‌گیرد؛ بنابراین اسپین‌ها آزادند جهت‌گیری‌های مختلفی را اختیار کنند. وجود این آزادی زمینه‌ساز ایجاد تبهگنی بزرگی در حالت پایه خواهد بود. در این شرایط که سیستم از رسیدن به حالت پایه‌ی مشخص بازمی‌ماند، گوئیم دچار ناکامی شده است. البته گاه ورود اثر افت و خیزهای گرمایی<sup>۱۳</sup> یا کوانتومی<sup>۱۴</sup> و یا ورود اثر ناخالصی‌ها می‌تواند منجر به از بین رفتن این تبهگنی عظیم شده و دستگاه را به حالت پایه‌ی مشخص ببرد [۵].

ظهور پدیده‌ی ناکامی می‌تواند رفتارهای جالبی را در سیستم ایجاد کند که مطالعه‌ی اثرات و نتایج آن جهت دستیابی به توجیه رفتارهای عجیب این‌گونه از ساختارها مفید خواهد بود. در این

<sup>۱۳</sup>Thermal fluctuations

<sup>۱۴</sup>Quantum fluctuations



شکل ۲.۱: انواع ناکامی. راست: ناکامی ناشی از برهم کنش های رقابتی. چپ: ناکامی هندسی.

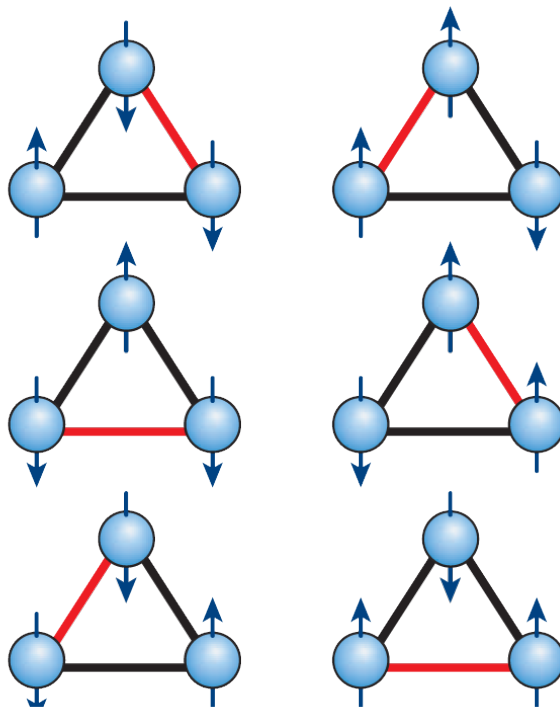
قسمت ابتدا انواع ناکامی را برمی شماریم و در ادامه به بررسی اثرات این پدیده بر رفتارهای سیستم های مغناطیسی اشاره می کنیم.

### ۱.۵.۱ ناکامی هندسی

پیدایش دسته ای از ناکامی ها به طور مستقیم به هندسه ی شبکه مربوط است. بررسی مدل آیزینگ بر روی شبکه ی مثلثی با برهم کنش های پادفرومغناطیس مثالی از این نوع ناکامی است [۶]. همان گونه که از شکل ۲.۱ برمی آید با در نظر گرفتن برهم کنش های پادفرومغناطیس، اسپین قرار گرفته در جایگاه سوم قادر نیست به طور هم زمان جهت گیری پادموازی نسبت به دو اسپین همسایه انتخاب نماید. بنابراین این منجر به شکل گیری تبهگنی شش گانه ی تصویر شده در شکل ۳.۱ می شود. در این حالت اسپین ها قادر به افت و خیز در سیستم بوده به گونه ای که فقط حالت های خاصی از سیستم انتخاب خواهند شد و اگر سیستم در حالت پایه ی خود بماند نوعی هم بستگی بین اسپین ها وجود خواهد داشت و جهت اسپین سوم به جهت گیری دو اسپین دیگر وابسته است بنابراین در این حالت هم بستگی ها کوتاه برد نیستند. به این گونه از مواد که در آن ها رفتارهای دسته جمعی مشاهده می شود، پارامغناطیس مشارکتی<sup>۱۵</sup> گوئیم [۱].

حال با توجه به تعداد کل ساختارهای مثلثی شامل  $N$  اتم می توان نتیجه گرفت که تعداد حالات تبهگن با افزایش اندازه ی دستگاه افزایش می یابد و باعث می شود که چنین دستگاهی حتی در دمای صفر هم یک آنتروپی فزون ور را تجربه کند و نقش آنتروپی هم چنان تعیین کننده باشد. این مطلب درک چرایی به کاربردن کلمه ی عظیم را برای تبهگنی حالت پایه در قسمت قبل آسان می سازد. اما اگر مدل  $XY$  را بر روی شبکه ی مثلثی به کار ببریم با توجه به جهت گیری های مشخص شده در شکل ۴.۱ واضح

<sup>۱۵</sup>Cooperative paramagnetism



شکل ۳.۱: حالت‌های تبهگن شبکه‌ی مثلثی با به‌کارگیری مدل آیزینگ با وارد کردن اثر برهم‌کنش‌های پادفرومغناطیس همسایه اول [۷].

است که گشتاورهای اسپینی با انتخاب زوایای  $120^\circ$  نسبت به هم، به راحتی به انرژی کمینه دست می‌یابند و بنابراین مدل  $XY$  و هم‌چنین مدل هایزنبرگ بر روی این شبکه ناکام نخواهند بود. مثال‌هایی از شبکه‌هایی که در آن‌ها ناکامی هندسی دیده می‌شود، به دو دسته‌ی شبکه‌های گوشه مشترک<sup>۱۶</sup> و لبه مشترک<sup>۱۷</sup> تقسیم می‌شوند [۵]. در دو بعد شبکه‌ی کاگومه و در سه بعد شبکه‌ی پایروکلر در دسته‌ی اول قرار می‌گیرند. شبکه‌های مثلثی و مکعبی مرکز سطحی مثال‌های دو بعدی و سه بعدی از دسته‌ی دوم هستند (شکل ۵.۱).

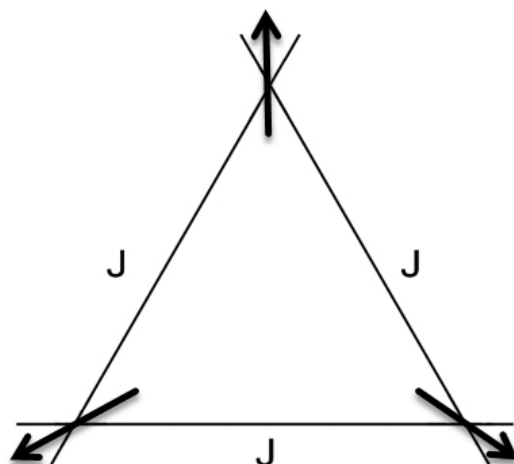
### ۲.۵.۱ ناکامی ناشی از برهم‌کنش‌های رقابتی

گونه‌ای دیگر از ناکامی که بر روی شبکه‌های دوبخشی رخ می‌دهد، ناکامی ناشی از اثر برهم‌کنش‌های رقابتی است. برهم‌کنش‌های همسایه اول پادفرومغناطیس بر روی شبکه‌های دوبخشی نظم نل<sup>۱۸</sup> ایجاد می‌کند. اما افزودن جمله‌ی برهم‌کنشی پادفرومغناطیس همسایه دوم و یا برهم‌کنش‌های چند اسپینی، به هامیلتونی هایزنبرگ معادله‌ی (۳.۱)، ممکن است باعث ایجاد ناکامی شود. همان‌گونه که در شکل

<sup>۱۶</sup>Corner sharing

<sup>۱۷</sup>Edge sharing

<sup>۱۸</sup>Néel order



شکل ۴.۱: مدل  $XY$  بر روی شبکه‌ی مثلثی. همه‌ی برهم‌کنش‌ها ارضا می‌شوند.

۲.۱ نشان داده شده، با وجود برهم‌کنش‌های همسایه اول پادفرومغناطیس، وارد کردن برهم‌کنش‌های همسایه دوم از این نوع، به طور هم‌زمان نمی‌تواند انرژی تک‌تک پیوندها را کمینه کرده و سیستم را به حالت پایه‌ی مشخصی هدایت کند. در این حالت باز هم تبهگنی ایجاد شده و سیستم ناکام می‌شود. مثال‌هایی از شبکه‌های دوبخشی که این دسته از ناکامی بر روی آن‌ها امکان وقوع دارد شامل شبکه‌های مربعی و لانه زنبوری در دو بعد و شبکه‌ی الماسی در سه بعد می‌باشند.

## مایع اسپینی

وقتی دستگاه اسپینی منظم می‌شود، هم‌بستگی‌ها شدید شده و بنابراین تقارن  $SU(2)$  اسپین‌ها شکسته می‌شود. در این شرایط اسپین‌ها رفتاری مشابه ملکول‌ها در جامد دارند چرا که در حالت جامد ملکول‌ها هم‌بسته‌اند و تقارن‌های فضایی را می‌شکنند. از طرف دیگر در ماده‌ای که در فاز گاز قرار دارد، ملکول‌ها کاملاً مستقل بوده و هیچ شکست تقارنی رخ نمی‌دهد. اسپین‌ها نیز در حالت بی‌نظم چنین رفتاری را نشان می‌دهند. اما در برخی دستگاه‌های اسپینی با وجود این که هیچ تقارن اسپینی در آن‌ها شکسته نمی‌شود ولی اسپین‌ها به طور کامل از هم مستقل نیستند.

به عنوان مثال در شبکه‌ی پایروکلر که از چهار وجهی‌های گوشه مشترک تشکیل یافته، همان‌طور که در شکل ۶.۱ نشان داده شده، چنان‌چه جهت اسپین‌ها که فاز یخ اسپینی را تشکیل می‌دهند تغییر کند، هم‌بستگی اسپین‌ها به گونه‌ای عمل می‌کند که جهت‌گیری اسپین‌های دیگر بتواند اسپین کل هر چهاروجهی را صفر کند. چنین شرایطی مشابه با فاز مایع در ملکول‌هاست. از این رو این نوع از نظم را مایع اسپینی می‌نامیم.