

سورة الفاتحة



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده‌ی فیزیک

**بررسی مدل‌های اسپینی پادفرومغناطیس به روش خودسازگار
گاوسی در شبکه‌های مکعبی ساده، مکعبی مرکز سطحی، کاگومه
و پایروکلیتر**

پایان نامه‌ی کارشناسی ارشد، گرایش ماده چگال

شیرین پورمیری

استاد راهنما

دکتر فرهاد شهبازی



دانشگاه صنعتی اصفهان
دانشکده ی فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد فیزیک ماده ی چگال خانم شیرین پورمیری
تحت عنوان

بررسی مدل های اسپینی پادفرومغناطیس به روش خودسازگار گاؤسی در شبکه های مکعبی ساده، مکعبی مرکز سطحی، کاگومه و پایروکلیتر

در تاریخ ۱۳۹۲/۶/۲۴ توسط کمیته ی تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

دکتر فرهاد شهبازی

۱- استاد راهنما پایان نامه

دکتر مجتبی اعلائی

۲- استاد مشاور پایان نامه

دکتر پیمان صاحب سرا

۳- استاد داور

دکتر فرهاد فضیله

۴- استاد داور

دکتر مجتبی اعلائی

سرپرست تحصیلات دانشکده ی فیزیک

... وَرَبِّي لَتَأْتِيَنَّكُمْ عَالِمِ الْغَيْبِ لَا يَعْزُبُ عَنْهُ مِثْقَالُ ذَرَّةٍ فِي السَّمَاوَاتِ وَلَا فِي الْأَرْضِ وَلَا أَصْغَرُ مِنْ ذَلِكَ وَلَا أَكْبَرُ إِلَّا فِي كِتَابٍ مُبِينٍ (آیه ۳ سوره سبأ)

... و خداوندی که از غیب آگاه است، به اندازه‌ی ذره‌ای در آسمان‌ها و در زمین از وی پوشیده نیست و کوچکتر از آن و بزرگتر از آن نیست مگر اینکه در کتاب روشن ثبت است.

قدردانی

سپاس بی‌کران پروردگاریت را که هستی‌ام بخشد و به همنشینی رحوان علم و دانش متخرم نمود و خوشه‌چینی از علم و معرفت را روزیم ساخت. با تقدیر و درود فراوان خدمت پدر و مادر بسیار عزیز، دلسوز و فداکارم که پیوسته جرعه‌نوش جام تعلیم و تربیت، فضیلت و انسانیت آنها بوده‌ام و همواره چراغ وجودشان روشنگر راه من در سختی‌ها و مشکلات بوده و با سپاس از برادرم که همراه همیشگی و پشتیبانی زندگیم بوده است. با تقدیر و شکر شایسته از استاد فریخته و فرزانه جناب آقای دکتر فرهاد شهبازی که با نکته‌های کراتقدر و گفته‌های ارزشمند، صحیفه‌های سخن را علم پرور نموده و همواره راه‌سما و راه‌گشای نگارنده در اتمام و اکمال این پایان نامه بوده‌اند.

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

تقدیم بہ پدر و مادر عزیزم کہ
از نگاہشان صلابت، از رفتارشان محبت و از صبرشان ایستادگی
را آموختم.

فهرست مطالب

۱	چکیده
۲	۱ مقدمه
۳	۱.۱ ناکامی مغناطیسی
۱۱	۲.۱ پذیرفتاری مغناطیسی و نظریه‌ی میدان میانگین
۱۴	۳.۱ نماهای بحرانی
۱۵	۴.۱ چند قانون تجربی
۱۶	۵.۱ مثال‌هایی از چند ماده با ناکامی هندسی
۱۹	۶.۱ توصیف فاز کولنی در شبکه‌های دو بخشی
۲۰	۱.۶.۱ شبکه‌ها
۲۴	۷.۱ جمع بندی
۲۵	۲ مدل هایزبرگ پادفرومغناطیس
۲۵	۱.۲ بررسی روش خود سازگار گاوسی
۲۷	۱.۱.۲ محاسبه‌ی ویژه مقادیر ماتریس برهمکنش
۲۷	۲.۱.۲ تابع همبستگی اسپینی
۲۸	۳.۱.۲ پذیرفتاری مغناطیسی
۲۸	۴.۱.۲ تابع انرژی داخلی
۲۸	۵.۱.۲ جمع بندی
۲۹	۳ به کارگیری روش خودسازگار گاوسی برای شبکه‌های مختلف
۳۰	۱.۳ شبکه مکعبی ساده
۳۶	۲.۳ شبکه‌ی مکعبی مرکز سطحی
۴۲	۳.۳ شبکه‌ی پایروکلر
۵۸	۴.۳ شبکه‌ی کاگومه
۷۵	۴ بحث و نتیجه‌گیری
۷۷	مراجع

چکیده

مواد ناکام هندسی حتی در دماهای پایین‌تر از دمای کوری وایز نیز در فاز پارامغناطیس باقی می‌مانند. با بررسی پادفرومغناطیس‌های ناکام هندسی مشاهده شده است که رویه‌ی حالت پایه‌ی این مواد دارای تبهگنی ماکروسکوپی بوده و این حالت پایه‌ی تبهگن، به هر گونه اختلالی بسیار حساس می‌باشد. در این پایان‌نامه ابتدا انواع ناکامی را معرفی کرده و پس از آن به بررسی مطالعات نظری گذار فاز در مواد ناکام هندسی می‌پردازیم. سپس قانون تجربی کوری وایز را معرفی می‌کنیم و رفتار یک ماده‌ی ناکام هندسی را بر اساس این قانون بررسی می‌کنیم. از آنجا که فاز کولنی تنها برای شبکه‌های دو بخشی به وجود می‌آید، این دسته از شبکه‌ها نیز معرفی شده است. پس از آن با توضیح فاز کولنی، شبکه‌ی مادر و شبکه‌ی میانی را نیز تعریف خواهیم کرد و رفتار میخکوبی شده در این نوع از شبکه‌ها را مورد مطالعه قرار خواهیم داد.

در فصل دوم تقریب خودسازگار گاؤسی را به طور مفصل بیان کرده و پس از آن نحوه‌ی به دست آوردن مقدار خودسازگار گاؤسی در دماهای مختلف را توضیح خواهیم داد. در قسمت بعد چگونگی محاسبه‌ی کمیت‌های ترمودینامیکی را با استفاده از این روش مطالعه می‌کنیم. در فصل سوم نیز با به کارگیری روش خودسازگار گاؤسی برای چند شبکه برخی از ویژگی‌های ترمودینامیکی آنها را بررسی می‌کنیم: ابتدا برای شبکه مکعب ساده با به دست آوردن مقادیر خودسازگار گاؤسی، تابع ساختار را رسم کرده و با توجه به آن دمای گذار را به دست می‌آوریم. با استفاده از روش خودسازگار، تابع پذیرفتاری مغناطیسی را محاسبه و آن را به ازای دماهای مختلف رسم خواهیم کرد. بنابراین نمای بحرانی پذیرفتاری با دقت خوبی نسبت به محاسبات مونت کارلو به دست می‌آید. همچنین نمودار تابع انرژی داخلی برای دماهای مختلف نیز رسم شده است. گذار فاز در شبکه fcc را در قسمت بعدی بررسی می‌کنیم. با روش خودسازگار گاؤسی تابع ساختار را رسم کرده و عدم پیدایش بیشینه‌ی منحصر به فرد در این نمودار را مطالعه می‌کنیم. اما می‌توان دید که در نظر گرفتن همسایه‌ی دوم موجب به وجود آمدن نظم در این شبکه می‌شود و متناسب با اینکه نوع برهمکنش همسایه دوم فرومغناطیس و یا پادفرومغناطیس باشد مکان بیشینه‌های تابع ساختار متفاوت خواهند بود.

بعد از آن مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس در شبکه‌ی پایروکلر را در نظر می‌گیریم و با محاسبه‌ی مقدار خودسازگار در دماهای مختلف تابع ساختار را رسم خواهیم کرد. اما می‌توان دید که با کاهش دما در این شبکه شاهد پیدایش هیچ بیشینه‌ی منحصر به فردی نخواهیم بود. بنابراین تأثیر در نظر گرفتن جمله‌ی ناهمسانگردی به هامیلتونی را مورد بررسی قرار خواهیم داد و می‌بینیم که چگونه به ازای مقادیر مختلف برای این جمله، نظم در این شبکه ایجاد می‌شود.

در آخر نیز مدل XY برای شبکه کاکومه در نظر گرفته شده و عدم به وجود آمدن نظم در این سیستم مورد مطالعه قرار گرفته شده است. پس از آن می‌بینیم که اضافه کردن جمله‌ی ناهمسانگرد به هامیلتونی مدل XY باعث رخ دادن گذار فاز در سیستم می‌شود. با محاسبه‌ی مقدار خودسازگار گاؤسی تابع ساختار را نیز رسم خواهیم کرد. سپس با محاسبه‌ی تابع پذیرفتاری مغناطیسی، نمای بحرانی پذیرفتاری را برای مقادیر مختلف جمله‌ی ناهمسانگردی محاسبه کرده‌ایم.

کلمات کلیدی:

مدل هایزنبرگ، ناکامی مغناطیسی، روش خودسازگار گاؤسی، فاز کولنی، نقاط میخکوبی شده

فصل ۱

مقدمه

مغناطش و پدیده‌های مغناطیسی به دلایل نظری و همچنین کاربرد در مواد مغناطیسی و وجود رفتارهای جمعی این دسته از مواد سال‌های زیادی است که توجه ما را به خود جلب کرده‌اند. از این‌رو در نظر گرفتن مدل‌های مختلف ریاضی در ساده‌تر شدن روند بررسی این مواد کمک کرده و باعث شده که سیستم‌های هم‌بسته‌ی قوی مغناطیسی را که یکی از موضوع‌های اصلی فیزیک ماده چگال می‌باشد، راحت‌تر بررسی نماییم. در بیشتر مواد وجود رفتار مغناطیسی به علت خواص الکترون‌هایی است که به واسطه‌ی باردار بودن، اسپین ذاتی و همچنین حرکت اوربیتالی آنها گشتاور مغناطیسی ذاتی و مداری به وجود خواهد آمد. هنگامی که یونها در شبکه قرار می‌گیرند، الکترون‌های آنها با هم برهم‌کنش کرده و موجب به وجود آمدن رفتارهای جمعی خواهند شد.

مدل آیزینگ

ساده‌ترین این مدل‌ها، مدل آیزینگ می‌باشد که در آن اسپین نقطه‌ی i ام شبکه را با σ_i نشان می‌دهیم که این پارامتر می‌تواند مقادیر $+1$ یا -1 را اختیار کند.

تابع هامیلتونی مدل آیزینگ را به صورت زیر تعریف می‌کنیم:

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

که در آن J ماتریس برهم‌کنش بین نقاط شبکه می‌باشد.

مدل هایزنبرگ کلاسیک

از آنجا که مدل آیزینگ مدلی غیرواقعی می‌باشد، مدل هایزنبرگ کلاسیک را به صورت زیر تعریف

می‌کنیم:

$$H = \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (2.1)$$

که در اینجا نیز J ماتریس بر همکنش بین نقاط مختلف شبکه و S_i بردار یکه می‌باشد و اسپین‌ها دارای سه مؤلفه‌ی فضایی خواهند بود.

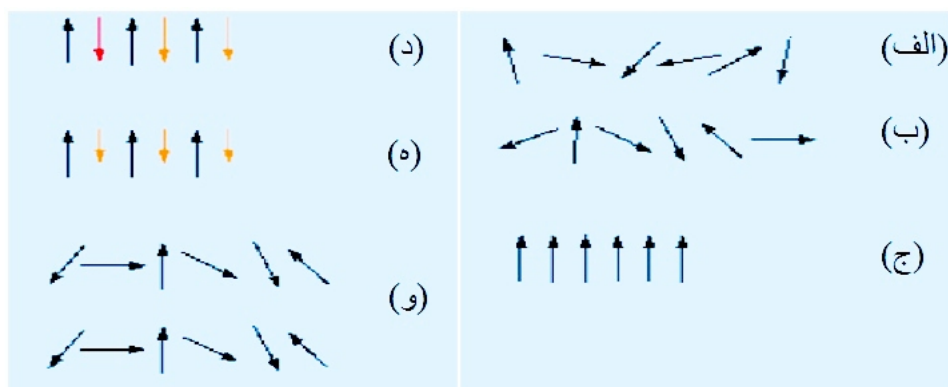
۱.۱ ناکامی مغناطیسی

ناکامی امری مهم در همه‌ی عرصه‌های علمی از جمله در تشکیل یخ می‌باشد. هرگاه بین برهمکنش‌های سیستم رقابت وجود داشته باشد و انرژی سیستم به صورت همزمان در همه‌ی این برهمکنش‌ها کمینه نشود سیستم را ناکام می‌نامیم. این برهمکنش‌ها منجر به تبهگن شدن حالت‌های سیستم شده و نوعی رفتار غیرمعقول در سیستم مشاهده می‌شود.

مهمترین مشخصه مواد مغناطیسی این است که در دمایی که در مقیاس برهم کنش‌های میکروسکوپی آنها باشد دستخوش گذار فاز شده و نظم بلندبردی در آنها ایجاد خواهد شد. اما برخلاف مواد مغناطیسی متعارف، مواد مغناطیسی ناکامی وجود دارند که در آنها شاهد هیچ‌گونه گذار فازی نخواهیم بود. اگر شدت ناکامی در سیستم زیاد باشد هیچ‌گونه نظمی در سیستم به وجود نخواهد آمد و سیستم تا دمای صفر در حالت مایع اسپینی باقی خواهد ماند. لازم به ذکر است که مایع اسپینی از فاز پارامغناطیس متفاوت می‌باشد. از جمله اینکه در فاز پارامغناطیس سیستم دارای هیچ‌گونه همبستگی نیست و برهمکنش‌ها کاملاً کوتاه‌برد می‌باشند، اما در مایع اسپینی در سیستم همبستگی به وجود می‌آید. این درحالی است که هیچ تقارنی در سیستم شکسته نخواهد شد و یا به عبارت دیگر هیچ مغناطش موضعی را برای سیستم نمی‌توانیم تعریف کنیم و اسپین‌ها قادر هستند هر جهت دلخواهی را انتخاب کنند. پس به طور کلی ناکامی هنگامی رخ می‌دهد که سیستم قادر به پیدا کردن کمینه انرژی خود نباشد [۱].

۱. اگر قدرت و علامت برهمکنش‌های اسپینی به صورت تصادفی تحمیل شود، این امر موجب به‌وجود آمدن کمینه‌های موضعی در انرژی اسپین‌ها خواهد شد. بنابراین اسپین‌ها در یک کمینه انرژی موضعی یخ زده خواهند شد. در اینجا منظور از برهمکنش‌های تصادفی این است که ویژه حالت یخ زده شده دارای هیچ الگوی متناوبی از نظم شبکه نباشد.

۲. حالت کلی دیگر زمانی رخ می‌دهد که ناکامی به دلیل هندسه‌ی شبکه به وجود بیاید که به این



شکل ۱.۱: دسته‌بندی نظم‌های مغناطیسی مختلف برای مواد (الف) و (ب) نظم پارامغناطیس (ج) نظم فرومغناطیس (د) نظم پادفرومغناطیس (ه) نظم فری مغناطیس (و) نظم شیشه‌ی اسپینی

دسته ناکامی هندسی^۱ گفته می‌شود. از آنجا که در مواد فرومغناطیس همه ی اسپین‌ها به طور یکتایی در یک جهت قرار می‌گیرند این دسته از مواد معمولاً قادر به داشتن این نوع ناکامی نیستند و هیچ رقابتی بین برهمکنش‌ها به وجود نمی‌آید. بنابراین برهمکنش‌های پادفرومغناطیس را در نظر خواهیم گرفت.

خواص يك جامد منظم توسط پیکربندی اتمی و خواص اتم‌ها مانند خاصیت مغناطیسی آنها و یا گشتاورهای الکترونی‌شان مشخص می‌گردد. در مواد فرومغناطیس گشتاور مغناطیسی یون‌های مجاور در يك راستا قرار می‌گیرند.

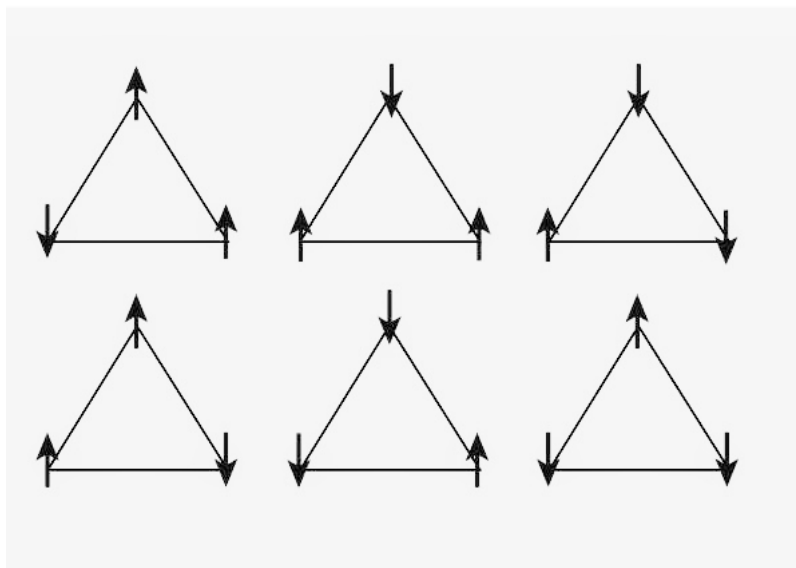
در برهمکنش‌های پادفرومغناطیس با در نظر گرفتن نزدیک‌ترین همسایه، گشتاور مغناطیسی یون‌ها به صورت پاد موازی قرار می‌گیرند که البته بررسی این شرایط کار آسانی نخواهد بود (شکل ۱.۱). پس به طور کلی شبکه‌ها را به دو دسته تقسیم می‌کنیم: شبکه‌های دو بخشی^۲ و شبکه‌های غیر دو بخشی^۳.

شبکه‌های دو بخشی از دو زیرشبکه‌ی مجزا به طوری تشکیل شده‌اند که نزدیک‌ترین همسایه‌ی هر نقطه از زیر شبکه‌ی اول بر روی زیر شبکه‌ی دوم واقع شده است. از آنجایی که همه‌ی گشتاورها روی زیر شبکه‌ی اول در يك راستا و همه‌ی گشتاورها روی زیر شبکه‌ی دوم در راستای مخالف قرار می‌گیرند، در این گونه شبکه‌ها همیشه می‌توان گشتاورهای پادفرومغناطیس با برهمکنش همسایه اول را بدون به وجود آمدن هیچ گونه ناکامی قرار داد.

^۱ geometrical frustration

^۲ bipartite lattice

^۳ nonbipartite lattice



شکل ۲.۱: حالت‌های تبهگن شبکه‌ی مثلثی با در نظر گرفتن مدل آیزینگ

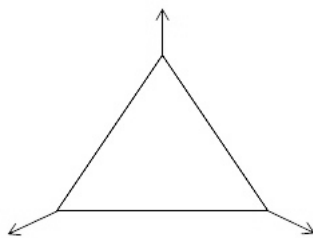
بنابراین در شبکه‌های دو بخشی با برهمکنش‌های پادرومغناطیس همسایه اول، ناکامی هندسی نخواهیم داشت. اما در شبکه‌های غیر دو بخشی این امکان که گشتاورهای مغناطیسی تمام همسایه‌ها با یکدیگر پادموازی قرار نگیرند وجود خواهد داشت که این مواد همان مواد با ناکامی هندسی می‌باشند. مواد مغناطیسی ناکام به اعمال اختلال‌های کوچک در دماهای پایین نظیر افت‌وخیزهای گرمایی و یا حضور ناخالصی‌های ساختاری بسیار حساس می‌باشند.

لازم به ذکر است که نظم شیشه‌ی اسپینی^۴ را هم می‌توان به عنوان نظم دیگری برای مواد تعریف کرد [۲]. سیستم‌های فیزیکی اغلب دارای ساختارهای تصادفی می‌باشند که فهمیدن نقش ناخالصی و اینگونه ساختارهای تصادفی مسئله‌ی مهمی در فیزیک ماده چگال می‌باشد. وجود بی‌نظمی‌های اندک در مواد در سرشت نظم‌های به وجود آمده بسیار مؤثر خواهد بود.

به عنوان مثال شبکه‌ی مثلثی شکل ۲.۱ را در مدل آیزینگ در نظر می‌گیریم. اگر برهمکنش فرومغناطیس ($J < 0$) داشته باشیم، اسپین‌ها همگی هم جهت خواهند بود. بنابراین انرژی همگی پیوندها کمینه خواهد شد. اما اگر برهمکنش پادرومغناطیس ($J > 0$) را در نظر بگیریم، اسپین سوم در انتخاب اینکه با کدام یک از دو اسپین دیگر خود را هماهنگ کند، ناکام خواهد ماند. بنابراین انرژی تک‌تک پیوندها به‌طور هم‌زمان کمینه نخواهد شد.

در اینجا انرژی کل سیستم تبهگن خواهد بود و برای حالت پایه‌ی سیستم یک تبهگنی ۶ گانه به‌وجود خواهد آمد که این تبهگنی ناشی از هندسه مساله می‌باشد. به عبارت دیگر اسپین‌ها قادر

^۴ Spin glass



شکل ۳.۱: شبکه‌ی مثلثی با مدل آیزینگ تأمیر یافته

به افت و خیز در سیستم بوده، اما این افت و خیزها به گونه‌ای است که فقط حالت‌های خاصی از سیستم انتخاب خواهند شد و اگر سیستم در حالت پایه‌ی خود بماند، نوعی همبستگی بین اسپین‌ها وجود خواهد داشت و جهت اسپین سوم به دو اسپین دیگر وابسته خواهد بود، بنابراین همبستگی در اینجا کوتاه‌برد نمی‌باشد. به اینگونه مواد که نوعی رفتار دسته جمعی در آن‌ها مشاهده می‌شود، پارامغناطیس‌های مشارکتی^۵ می‌گوییم.

از آنجا که این ناکامی در رسیدن به حالت پایه با افزایش اندازه سیستم کاهش نمی‌یابد، بررسی افزایش ناکامی هندسی با بزرگ‌تر شدن اندازه‌ی سیستم در تشخیص واقعی بودن ناکامی بسیار مهم است.

حال اگر زاویه‌ی اسپین‌ها را دو به دو به 120° فرض کنیم (شکل ۳.۱) و همان هامیلتونی مدل پادفرومغناطیس را برای سیستم به صورت زیر بازنویسی کنیم داریم:

$$J \sum_{ij} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{1}{4} J [(\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3)^2 - (|\vec{S}_1|^2 + |\vec{S}_2|^2 + |\vec{S}_3|^2)] \quad (3.1)$$

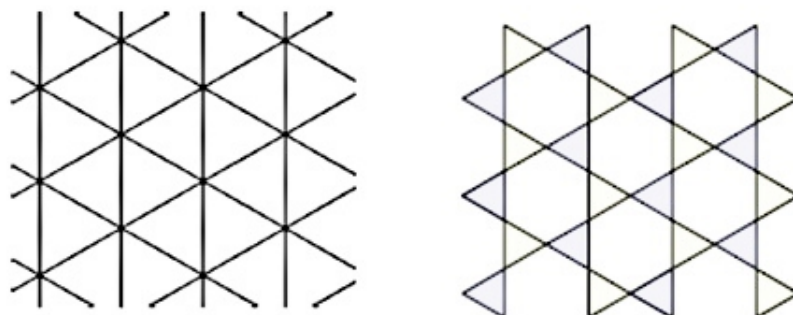
در اینجا می‌توان دید که دیگر ناکامی مغناطیسی مشاهده نمی‌شود و زمانی که همه‌ی اسپین‌ها به سمت داخل یا خارج مرکز مثلث باشند مجموع اسپین‌ها $(\vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3)$

کمینه خواهد شد. همانطور که دیده می‌شود شبکه‌ی مثلثی در مدل هایزنبرگ ناکام نیست. در شکل ۴.۱ دو مثال از دو شبکه دو بعدی با ناکامی هندسی نشان داده شده‌اند. در شبکه‌ی مثلثی مثلث‌ها از لبه^۶ و در شبکه‌ی کاگومه مثلث‌ها از گوشه^۷ به یکدیگر متصل شده‌اند. به همین ترتیب

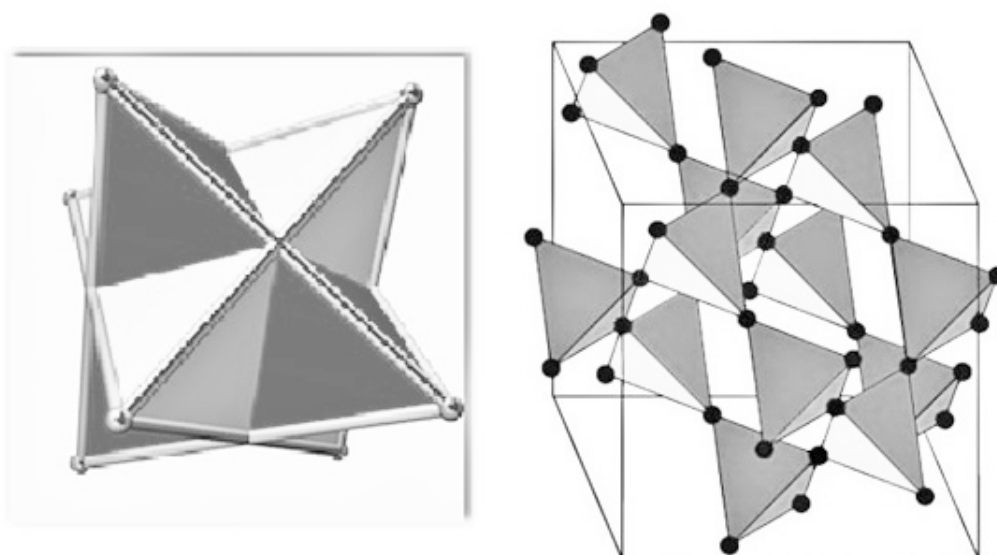
^۵paramagnetism cooperative

^۶edge-sharing

^۷corner-sharing



شکل ۴.۱: شکل سمت چپ. شبکه‌ی مثلثی با مثلث‌های ازلبه به هم متصل. شکل سمت راست. شبکه‌ی کاگومه با مثلث‌های ازگوشه به هم متصل [۱].



شکل ۵.۱: شکل سمت چپ: شبکه‌ی مکعبی مرکز سطحی با چهاروجهی‌های ازلبه به هم متصل. شکل سمت راست: شبکه‌ی پایروکلر با چهاروجهی‌های ازگوشه به هم متصل [۱].

برای شبکه‌های سه‌بعدی در شکل ۵.۱ شبکه‌ی پایروکلر متشکل از چهار وجهی‌هایی است که از گوشه به یکدیگر متصل شده‌اند، اما در شبکه‌ی مکعبی مرکز سطحی پر چهار وجهی‌ها از لبه کنار هم قرار گرفته‌اند.

حال به طور کلی شبکه‌هایی که غیر دو بخشی باشند و در آنها خوشه‌ها از گوشه به یکدیگر متصل شده باشند را بررسی می‌کنیم. شبکه‌های کاگومه و پایروکلر که از مثلث‌ها و چهاروجهی‌های از گوشه به هم متصل تشکیل شده‌اند، مثال‌های خوبی از این نوع شبکه‌ها می‌باشند. همچنین اگر برای این مدل‌ها تابع هامیلتونی را بر حسب ثابت برهم‌کنش J و بردارهای اسپینی \vec{S}_i و \vec{S}_j بنویسیم داریم [۱]:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j = \frac{J}{\nu} \sum_{\alpha} |\vec{L}_{\alpha}|^2 + C \quad (۴.۱)$$

که

$$\vec{L}_{\alpha} = \sum_{i \in \alpha} \vec{S}_i \quad (۵.۱)$$

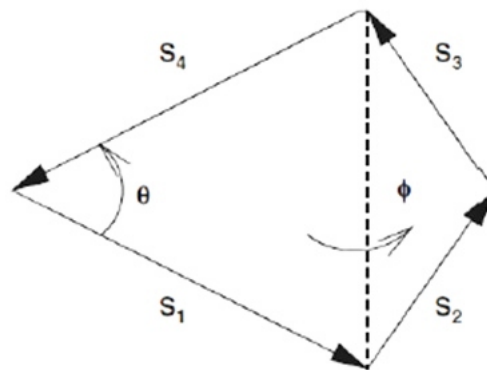
در اینجا جمع اول بر روی همسایه‌های i و j بسته می‌شود و جمع دوم بر روی خوشه‌های α اعمال می‌شود. به طور مثال اگر این هامیلتونی را برای مدل هایزنبرگ پادفرومغناطیس در نظر بگیریم می‌توان تابع هامیلتونی را به صورت زیر باز نویسی کرد.

$$H = \frac{J}{\nu} \sum_{\alpha} |\vec{L}|^2 + C \quad (۶.۱)$$

$$\vec{L} = \vec{S}_1 + \vec{S}_2 + \vec{S}_3 + \vec{S}_4$$

که L جمع روی اسپین‌های هر چهاروجهی است. در اینجا با توجه به شرط $J > 0$ حالت پایه‌ی سیستم هنگامی رخ می‌دهد که جمع اسپین‌ها روی هر چهاروجهی صفر شود و بنابراین همانطور که دیده می‌شود سیستم قادر به یافتن یک حالت پایه‌ی منحصر به فرد نخواهد بود.

اکنون می‌توان دید که هر چهاروجهی منجر به یافتن ۳ معادله در راستای x و y و z می‌شود. همچنین به دلیل وجود ۴ اسپین که هر کدام دارای دو مولفه می‌باشند در نهایت ۸ مجهول خواهیم داشت، بنابراین تعداد کل درجات آزادی برابر با ۵ خواهد شد که از این مقدار ۳ درجه آزادی مربوط به انتخاب دستگاه x و y و z می‌باشد. بنابراین تنها دو درجه آزادی برای سیستم باقی می‌ماند که در شکل ۶.۱ نشان داده شده‌اند. در صورتی که تعداد چهاروجهی‌ها زیاد شود، تعداد درجات آزادی نیز مقادیر بیشتری را اختیار می‌کند. از طرفی با توجه به مستقل فرض کردن قیود، تبهگنی واقعی از این



شکل ۶.۱: پیکربندی از یک خوشه‌ی ناکام هندسی با ۴ اسپین‌هایزنگ [۱]

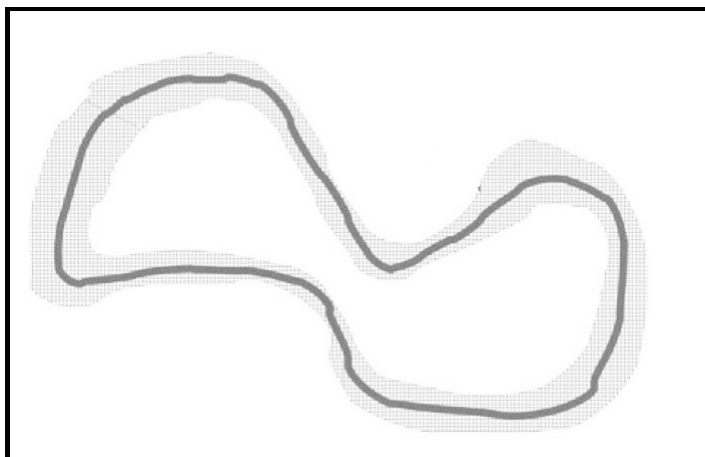
مقدار بیشتر خواهد بود. پس می‌توان دید که با افزایش اندازه‌ی سیستم، تبهگنی نیز رشد کرده و یک تبهگنی فزونور^۸ خواهیم داشت. به عبارت دیگر هیچ نظم بلندبردی در سیستم به‌وجود نخواهد آمد و بعد رویه‌ی حالت پایه در حد ترمودینامیک بینهایت خواهد شد.

اکنون اگر برای شبکه‌ی پایروکلر درجات آزادی را بررسی کنیم، هامیلتونی فوق به صورت جمع روی واحدهای چهاروجهی نوشته می‌شود. حال اگر تعداد اسپین‌ها را با N_s و تعداد خوشه‌ها را با N_c نشان دهیم [۱]، از آنجا که تعداد درجات آزادی دو برابر تعداد اسپین‌ها بوده $N_s = 2N_c$ می‌باشد. از طرفی چون هر اسپین دو درجه آزادی داشته، تعداد درجات آزادی دو برابر تعداد اسپین‌ها بوده و تعداد قیدها نیز سه برابر تعداد واحدهای چهاروجهی‌ها می‌باشد. اما هر اسپین بین دو واحد مشترک است و بنابراین در هر واحد نصف اسپین‌ها قرار خواهند گرفت، بنابراین می‌توان گفت که تعداد اسپین‌ها دو برابر تعداد واحدهای چهاروجهی می‌باشد و از اینجا می‌شود نتیجه گرفت که:

$$\begin{cases} F = 2N_s \\ K = 3N_c \end{cases} \implies D = F - K = N_c \quad (7.1)$$

که در اینجا D بعد رویه‌ی حالت پایه را مشخص می‌کند. البته لازم به ذکر است که این حد پایین تبهگنی می‌باشد و در حالت کلی چون قیدها از یکدیگر مستقل بوده، تبهگنی بیشتر خواهد بود. با در نظرگرفتن همین روند برای شبکه‌ی کاگومه می‌توان مشاهده کرد که برای ارضاء شدن شرط کمینه انرژی، لازم است تا جمع اسپین‌ها بر روی هر مثلث صفر شود که این نیز منجر به یک تبهگنی فزونور خواهد شد.

^۸ extensive degeneracy



شکل ۷.۱: فضای فاز برای یک ماده با ناکامی هندسی [۱]

به طور کلی شکل ۷.۱ نمایی از فضای فاز را برای یک شبکه‌ی ناکام هندسی نشان می‌دهد. همانطور که دیده می‌شود افت‌وخیزها باعث پهن شدن رویه‌ی حالت پایه‌ی سیستم می‌شوند. به نظر می‌رسد که همه‌ی حالت‌ها در دمای صفر با احتمال یکسان وجود دارند و سیستم در پیدا کردن حالت پایه‌ی خود دچار ناکامی خواهد شد. اما در نظر گرفتن نوسانات گرمایی^۹ یا کوانتومی^{۱۰} در دمای محدود موجب محدودتر شدن سیستم می‌شود که این امر خود نوعی تناقض را در بر دارد. در حالت کلی همیشه افت‌وخیزهای گرمایی یا کوانتومی موجب بی‌نظم‌تر شدن سیستم می‌شوند، اما در اینجا افت‌وخیزها باعث منظم‌تر شدن سیستم شده‌اند و این مفهوم در حقیقت همان نظم به وسیله‌ی بی‌نظمی می‌باشد [۳، ۴].

برای مثال در شکل ۸.۱ دو پیکربندی خطی^{۱۱} و غیر خطی^{۱۲} از اسپین‌ها را طوری در نظر می‌گیریم که در هر دو نمونه جمع اسپین‌ها صفر شود. حال اگر اسپین‌ها را به اندازه‌ی $\delta\theta$ از حالت قبل خارج کنیم، با توجه به ظاهر شدن $\cos(\delta\theta)$ در پیکربندی خطی و بسط این جمله $L^2 \propto (\delta\theta)^4$ خواهد شد، بنابراین افزایش انرژی از مرتبه‌ی $(\delta\theta)^2$ خواهد بود. اما برای پیکربندی غیر خطی با توجه به ظاهر شدن عامل $\sin(\delta\theta)$ ، $L^2 \propto (\delta\theta)^2$ خواهد شد و برای θ های کوچک انرژی این حالت کمتر می‌شود. به این حالت‌ها که حتی با انرژی بسیار کم نیز برانگیخته می‌شوند "مدهای نرم"^{۱۳} می‌گوییم. پس هر چه در یک پیکربندی تعداد مد نرم بیشتری وجود داشته باشد، احتمال آن حالت بیشتر خواهد بود. زیرا با توجه به $F = E - TS$ اگر دو حالت را با انرژی‌های یکسان در نظر بگیریم حالتی که آنتروپی آن

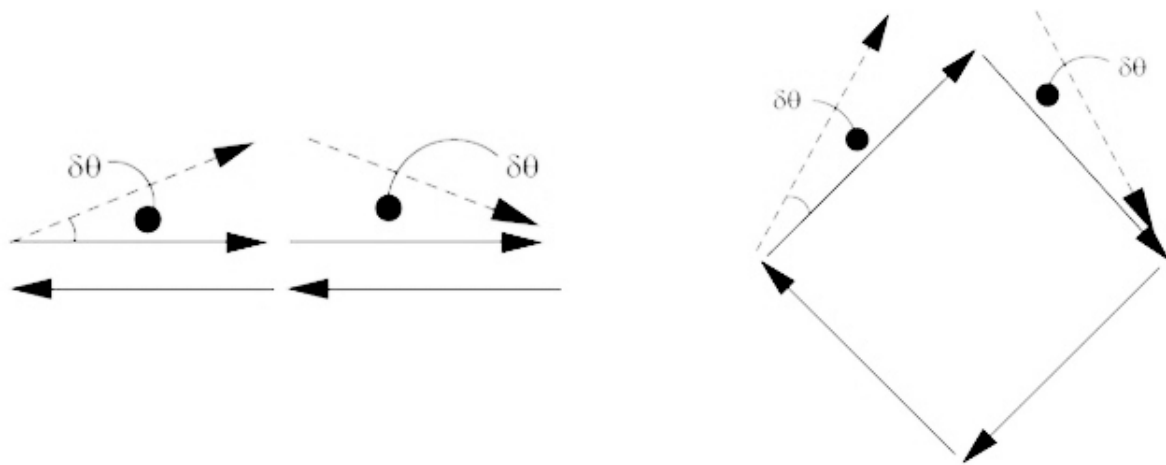
^۹thermal fluctuations

^{۱۰}quantum fluctuations

^{۱۱} linear

^{۱۲} nonlinear

^{۱۳}soft mode



شکل ۸.۱: افت و خیزهای پیکربندی حالت پایه برای یک خوشه‌ی ۴ اسپینی [۱]

بیشتر باشد، توسط سیستم اختیار خواهد شد. بنابراین افت و خیزهای گرمایی حالت‌هایی را انتخاب می‌کنند که تعداد مد نرم بیشتری را دارا باشند.

۲.۱ پذیرفتاری مغناطیسی و نظریه‌ی میدان میانگین

اگر تابع هامیلتونی را به صورت زیر در نظر بگیریم:

$$H = -\frac{J}{\nu} \sum_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j - \vec{h} \cdot \sum_i \vec{S}_i \quad (۸.۱)$$

تغیرات خطی مغناطش کلی $\sum_i S_i^z$ هنگام اعمال یک میدان خارجی را پذیرفتاری مغناطیسی می‌نامیم، که با تعریف $\chi = \frac{\partial m}{\partial h}$ و با در نظر گرفتن تابع هامیلتونی فوق، تابع پارش به صورت زیر محاسبه می‌شود.

$$Z = Tr[e^{-\beta \frac{J}{\nu} \sum_{ij} S_i S_j + \beta h \sum_i S_i}] \quad (۹.۱)$$

$$\begin{aligned}\sum_i \langle S_i \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}(\sum_i S_i e^{-\beta H}) = \frac{1}{\beta Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \\ \sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle &= \frac{1}{Z} \text{Tr}(\sum_{ij} S_i S_j e^{-\beta H}) = \frac{1}{\beta^2 Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial h} \right)^2\end{aligned}\quad (10.1)$$

بنابراین شکل کلی تابع پذیرفتاری مغناطیسی به صورت زیر خواهد بود.

$$\begin{aligned}\chi(T) &= \frac{\partial m}{\partial h} = \frac{1}{N\beta} \frac{\partial \left(\frac{1}{Z} \frac{\partial Z}{\partial h} \right)}{\partial h} \\ &= \frac{1}{\beta N} \left[\frac{1}{Z} \left(\frac{\partial Z}{\partial h} \right)^2 - \frac{1}{Z^2} \left(\frac{\partial Z}{\partial h} \right)^2 \right] \\ &= \frac{1}{NT} \left[\sum_{ij} \langle S_i S_j \rangle - \left(\sum_i \langle S_i \rangle \right)^2 \right]\end{aligned}\quad (11.1)$$

پس می‌توان نشان داد که در دماهای بالا پذیرفتاری مغناطیسی و تابع همبستگی به صورت زیر با یکدیگر مرتبط هستند [۱۲].

$$\chi(T) = \frac{1}{NT} \langle \left(\sum_i S_i^z \right)^2 \rangle = \frac{1}{NT} \sum_{ij} \langle S_i^z S_j^z \rangle \quad (12.1)$$

قانون کوری وایز^{۱۴} نیز که بعداً به معرفی آن می‌پردازیم، بیانگر نحوه رفتار پذیرفتاری در دماهای بالا می‌باشد. از آنجا که در دماهای خیلی بالا اسپین‌ها از هم مستقل هستند داریم:

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle = \frac{1}{\mathfrak{M}} S(S+1) \delta_{ij},$$

که عدد $\frac{1}{\mathfrak{M}}$ به دلیل همسانگرد بودن اسپین‌ها و $S(S+1)$ برگرفته از میانگین کل S^2 می‌باشد. حال اگر این میانگین گرمایی را در دماهای بالا بسط دهیم داریم:

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

از آنجا که تمام نقاط شبکه در دماهای نامحدود از هم مستقل می‌باشند، هامیلتونی فقط دارای جملاتی است که جایگاه‌های مختلف را با هم جفت می‌کند. در اینجا تنها تا جمله‌ی مرتبه‌ی یک را برای β در مخرج کسر فوق لحاظ می‌کنیم.

^{۱۴} Curie Weiss

$$\langle S_i^z S_j^z \rangle \simeq \frac{1}{3} S(S+1) - \beta \left[\frac{1}{3} J_{ij} \langle S_i^z S_j^z \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \rangle_0 + \frac{1}{3} J_{ij} \langle S_i^z S_j^z \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_i \rangle_0 \right]. \quad (14.1)$$

از طرف دیگر، با توجه به اینکه مولفه‌های مختلف اسپین با یکدیگر همبسته نمی‌باشند، با بسط مرتبه اول تابع همبستگی می‌توان نوشت:

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

سرانجام با جایگذاری عبارت فوق در معادله‌ی ۱۲.۱ پذیرفتاری به شکل زیر بازنویسی 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 شبکه‌هایی که عدد هم‌آرایی آنها z باشد و فقط نزدیک‌ترین همسایه‌های هر سایت را در نظر بگیریم، J_0 به صورت زیر می‌باشد که J_{ij} قدرت برهمکنش برای پیوندهای نزدیک‌ترین همسایه می‌باشد.

$$\theta = \frac{S(S+1)}{3} J_0$$

$$J_0 = \frac{1}{N} \sum_{ij} J_{ij} = zJ.$$

حال اگر وارون پذیرفتاری را محاسبه کنیم داریم:

$$\chi^{-1}(T) = \frac{3}{S(S+1)} [T + \theta + \dots], \quad (17.1)$$

که این عبارت به نوعی منجر به قانون کوری‌وایز خواهد شد. با توجه به نتایج اندازه‌گیری آزمایش‌های پذیرفتاری مغناطیسی در دماهای بالا می‌توان Θ_{CW} که همان محل تقاطع خط با محور T می‌باشد را به دست آورد و همان طور که مشخص است با داشتن مقدار این کمیت قادر به محاسبه‌ی قدرت و علامت برهمکنش‌های اسپینی خواهیم بود. در حالت کلی، مقدار منفی Θ_{CW} بیانگر برهمکنش پادفرومغناطیس و مقدار مثبت این کمیت نشانگر فرومغناطیس بودن نوع برهمکنش می‌باشد.