

تقدیم به

# پدر و مادر عزیزم

## تقدیر و تشکر

به نام او که دانای فرزانه است، بی آنکه که گام سپارد می داند، بی آنکه بنگرد می بیند، بی عمل سامان می بخشد و اوست دانای مطلق. خداوند بزرگ را شاکرم که به من فرصت تجربه ی محیطی علمی با اساتید و دوستانی بزرگوار عطا فرمود.

از پدر و مادر عزیز و مهربانم به جهت تمام صبوری ها و حمایت هایشان در طول دوران تحصیلم سپاسگزارم و همواره مدیون شان هستم و خواهم بود.

از استاد راهنمای ارجمندم جناب آقای دکتر سعید مهدوی فر که با صبوری ها، مساعدت ها و راهنمایی های مثال زدنی شان مرا در به انجام رسانیدن این پایان نامه راهنمایی نمودند که بدون مبالغه نه تنها یک استاد اکادمیک متبحر بلکه یک نمونه ی اخلاق نیز می باشند، بی نهایت سپاسگزارم.

از جناب آقای دکتر رحیم پور به جهت تمامی زحمات و حمایت های بی دریغشان قدردانی می کنم.

از داوران محترم جناب آقای دکتر فرجامی و جناب آقای دکتر رسولی به جهت داوری کار متشکرم.

## فهرست مطالب

صفحه	عنوان
خ	چکیده فارسی
د	چکیده انگلیسی
۱	مقدمه

### فصل اول: روش لnkشوز

3	1-1 مقدمه
4	2-1 روش لnkشوز
9	3-1 نقاط ضعف روش لnkشوز

### فصل دوم: گذار فاز کوانتومی

11	1-2 مقدمه
12	2-2 گذار فاز
14	3-2 گذار فاز کوانتومی
18	1-3-2 مدل ساده ی آیزینگ در میدان عرضی
20	2-3-2 دایمر های جفت شده ی پاد فرومغناطیس

### فصل سوم: سیستم های اسپینی

24	3-1 مقدمه
25	2-3 مغناطیس در یک بعد

- 25 ----- 1-2-3 قضیه ی مرین - واگنر
- 27 ----- 3-3 حل عددی مدل های اسپینی
- 29 ----- 4-3 مقدمه ای بر سیستم های اسپینی
- 30 ----- 1-4-3 مدل هایزبرگ اسپین - 1/2
- 31 ----- 2-4-3 مدل هایزبرگ اسپین - 1/2 در حضور میدان مغناطیسی همگن و متناوب
- 31 ----- 3-4-3 مدل هایزبرگ اسپین - 1/2 در حضور میدان مغناطیسی خارجی
- 32 ----- 4-4-3 زنجیره های اسپین - 1/2 تغییر یافته
- 33 ----- 5-4-3 نردبان اسپینی
- 33 ----- 5-3 نمونه ی تجربی

## فصل چهارم: مطالعه ی زنجیره ی تترامر شده ی اسپین - 1/2 در حضور میدان مغناطیسی عرضی

- 37 ----- 1-4 مقدمه
- 38 ----- 2-4 هامیلتونی موثر
- 39 ----- 1-2-4 بررسی مسئله در حد جفت شدگی قوی پادفرومغناطیس
- 41 ----- 1-2-4 نگاشت هامیلتونی
- 45 ----- 3-4 نتایج عددی
- 46 ----- 1-3-4 بررسی نمودار فاز حالت پایه
- 50 ----- 2-3-4 بررسی فرآیند مغناطش
- 53 ----- 3-3-4 تابع همبستگی نظم رشته ای

56	-----	4-3-4 تابع همبستگی پارامتر نظم پادفرومغناطیس_راه راه
59	-----	5-3-4 پارامتر نظم جفت های دایمر شده
64	-----	4-4 نتیجه گیری
64	-----	5-4 پیشنهادها برای ادامه ی کار
65	-----	مراجع

## فهرست شکل ها

صفحه

عنوان

- شکل 1-1: نمایش شماتیکی از روش لنگشوز ----- 7
- شکل 2-1: نمایش شماتیکی زنجیره ی خطی تولید شده در فرآیند لنگشوز ----- 9
- شکل 1-2: نمایش موقعیت یون های  $HO^{+3}$  در عایق  $LiHO F_4$  ----- 16
- شکل 2-2: وابستگی گشتاور مغناطیسی متوسط  $\langle M_z \rangle$  بر حسب قدرت میدان مغناطیسی اعمال شده  $T = 0$  ----- 18
- شکل 3-2: پادرومغناطیس دایمر شده. کیوبیت ها روی سایت ها قرار گرفته اند ----- 20
- شکل 4-2: حالت پادرومغناطیس برای ----- 21
- شکل 5-2: برانگیختگی تریپلون در  $g > g_c$  ----- 22
- شکل 6-2: حالت پایه با نظم پادرومغناطیس برای  $g < g_c$  ----- 23
- شکل 1-3: گرمای ویژه ی مغناطیسی، در میدان مغناطیسی خارجی ----- 35
- شکل 2-3: نمودار دما که ناهنجاری نوع  $\lambda$  بر حسب تابعی از  $H$  برای صفحه ی  $H \perp C, H \perp A$  ----- 36
- شکل 1-4: نمایش جفت شدگی های سلول واحد، یک زنجیره ی  $AF_1 - F - AF_2 - F$  هایزنبُگ متناوب -- 37
- شکل 2-4: طرح نمادین نمایش یک زنجیره ی هایزنبُگ تترامر شده ی متناوب. ----- 39
- شکل 3-4: سطوح انرژی حالت های اسپینی در دایمر شده ی بدون بر هم کنش ----- 40
- شکل 4-4: شکل نمادین نردبانی معادل زنجیره ی تترامر شده. ----- 41
- شکل 5-4: اختلاف انرژی دومین حالت برانگیخته و اولین حالت برانگیخته بصورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی. ----- 46
- شکل 6-4: گاف انرژی سیستم به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$  ----- 47
- شکل 7-4: گاف انرژی سیستم به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$  و مقدار  $\Delta = 1$  ----- 49
- شکل 8-4: گاف انرژی سیستم به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$  ب در حالت همسانگرد  $\Delta = +0/5$  ----- 50

- شکل 4-9: منحنی مغناطش در راستای میدان عرضی بر حسب میدان اعمال شده ----- 52
- شکل 4-10: تابع همبستگی نظم رشته ای به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$  ----- 53
- شکل 4-11: تصویر شماتیک زنجیره  $AF_1-F-AF_2-F$  تترامر اسپین  $\frac{1}{2}$ . ----- 56
- شکل 4-12: تابع همبستگی پارامتر نظم راه راه، بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$ . ----- 58
- شکل 4-13: تابع همبستگی پارامتر نظم راه راه  $J_{AF2}$ ، بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$ . ----- 59
- شکل 4-14: تابع همبستگی پارامتر نظم راه راه  $J_{AF1}$ ، بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی ----- 60
- شکل 4-15: پارامتر نظم دایمر شدگی بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$  ----- 62
- شکل 4-16: پارامتر نظم دایمر شدگی دایمرهای پادفرومغناطیس ضعیف بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی  $h$  ----- 63
- شکل 4-17: پارامتر نظم دایمر شدگی دایمر پادفرومغناطیس قوی بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی. ----- 64

اثر میدان مغناطیسی عرضی روی زنجیره ی تترامر شده ی ناهمسانگرد اسپین-1/2 در دمای صفر

محبوبه شعبانی اربوسرا

یکی از مهم ترین موضوعات فیزیک در دهه های اخیر، جستجوی موادی است که اتم ها شکل جدیدی از نظم را نشان دهند که ممکن است روزی برای ساختن شکل کاملاً جدیدی از ابزار الکترونی استفاده گردند.

در این پایان نامه، یک حالت پادفرومغناطیس تترامر شده در نظر گرفته شده است. تا به حال هیچ گزارشی تجربی در این مورد ارائه نشده است بنابراین مطالعه ی این مواد می توانند از نقطه نظر تئوری جالب باشد. ما نمودار فاز حالت پایه سیستم زنجیره ی  $AF_1 - F - AF_2 - F$  اسپین - 1/2 با ناهمسانگردی در جفت شدگی فرومغناطیس غالب مورد بررسی قرار داده ایم. از روش لنگشوز برای قطری سازی عددی زنجیره ی محدود استفاده می کنیم. با استفاده از نتایج قطری سازی، پارامترهای نظم بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی مختلف را محاسبه می کنیم.

بر اساس نتایج قطری سازی دقیق، تلفیق فضایی روی لینک های پادفرومغناطیس، یک گاف جدید در سیستم در حضور میدان مغناطیسی عرضی در محدوده ی  $h_c^- < h < h_c^+$  ایجاد می کند. به علاوه دو گاف جدید در طیف در نواحی  $h_{c1} < h < h_c^-$ ،  $h_c^+ < h < h_{c2}$  به علت ناهمسانگردی ایجاد می شوند. مشخص شد که در ناحیه ی میانی مقادیر میدان  $h_{c1} < h < h_{c2}$ ، یک فاز جالب پادفرومغناطیس - راه راه وجود دارد.

کلید واژه: پادفرومغناطیس تترامر شده، پارامتر نظم، ناهمسانگردی، روش لنگشوز



## مقدمه

مطالعه ی مواد مغناطیسی در ابعاد پایین به خصوص در یک بعد مورد توجه ویژه ای در دهه های اخیر قرار گرفته است. از آنجا که می تواند منجر به پدیده های نوظهور و شگفت انگیزی گردد. از جمله دلایل اهمیت مواد مغناطیسی در یک بُعد این است که اهمیت افت و خیزهای کوانتومی در یک بُعد سیستم کنترل می کند. همچنین در دیدگاه تجربی نیز فرصت هایی برای مشاهده ی سیستم های یک بُعدی ایجاد شده است. به عنوان مثال، در ترکیبات  $(CH_3)_2CHNH_3CuCl_3$  (IPACuCl3) و ترکیب زنجیره متناوب  $Pb_2V_3O_9$ ، گاف انرژی در غیاب میدان مغناطیسی خارجی از تحلیل پذیرفتاری و ظرفیت گرمایی ویژه، به طور تجربی تخمین زده شده است. علاوه بر این مدل هایی وجود دارد که مثل مدل های نبرگ که دارای حل دقیق می باشند، بنابراین با مقایسه ی نتایج عددی حاصله با حل دقیق می توانیم درستی نتایج عددی را تأیید کنیم. با نتایجی که از آزمایش عددی بدست می آوریم، قادر خواهیم بود یک تحلیل در اندازه ی متناهی انجام دهیم و داده های خود را برون یابی کرده و رفتار سیستم را در حد ترمودینامیک بررسی نماییم.

در سالهای اخیر گذار فاز کوانتومی در فیزیک ماده چگال به موضوعی جالب برای فیزیکدانان نظری تبدیل شده است. این گذار فازها، تغییرات ایجاد شده توسط افت و خیزهای کوانتومی را شرح می دهند. در واقع یک پارامتر خارجی، غیر از دما، افت و خیز کوانتومی ایجاد کرده و این افت و خیزها، نظم مرسوم را در دمای صفر مطلق از بین می برند. یکی از اهداف مهم فیزیک نظری سیستم های اسپینی کوانتومی، بررسی وضعیت هایی است که سیستم می تواند در فازهایی قرار گیرد که دارای گاف انرژی اند و منشا گاف در آنها متفاوت است. یک حالت بسیار جالب، وضعیتی است که ثابتهای جفتیدگی تبادل اسپینی به صورت فضایی تغییر می کنند. در این پایان نامه یک زنجیره ی  $AF_1 - F - AF_2 - F$  اسپین  $1/2$  را که زنجیره ی تترامر شده نیز نامیده می شود را در نظر گرفته ایم. توسط آزمایش عددی اثر ناهمسانگردی در برهم کنش تبدالی فرومغناطیسی و اعمال میدان مغناطیسی عرضی روی این زنجیره ی متناوب را مورد بررسی قرار داده ایم.

ساختار این پایان نامه به این صورت است که در فصل اول روش عددی لنگشوز را معرفی می کنیم. در فصل دوم گذار های فاز کوانتومی را بررسی می کنیم و مفاهیم اساسی گذار فاز را بیان می کنیم. در فصل سوم انواع مختلف مدل های اسپینی

را معرفی می کنیم و به نمونه ای از اندازه گیری های توابع پاسخ در تجربه اشاره می کنیم. در فصل چهارم زنجیره ی تترامر شده ی  $AF_1 - F - AF_2 - F$  اسپین  $1/2$  متناوب را با ناهمسانگردی تبادل فرومغناطیس در حضور میدان مغناطیسی عرضی مورد مطالعه قرار می دهیم. نمودار فاز حالت پایه ی این مدل را با استفاده از روش لنگشوز بدست می آوریم. در این فصل پارامتر های نظم مختلف را به صورت تابعی از میدان مغناطیسی عرضی مورد بررسی قرار می دهیم و با استفاده از نتایج قطری سازی، گاف اسپینی، مغناطش، پارامتر نظم رشته ای، پارامتر نظم دایمر شدگی و پارامتر نظم پادفرومغناطیس\_راه راه را بر حسب تابعی از میدان مغناطیسی عرضی محاسبه می کنیم.

# فصل اول

## روش لnkشوز

### 1-1 مقدمه

برای بررسی مسائل عددی در فیزیک بس ذره ای، احتیاج به کار کردن با ماتریس های بزرگ داریم. حتی اگر ماتریس اسپارس<sup>1</sup> باشد، (تعداد زیادی از عناصر ماتریس برابر صفر می باشد)، مسئله را نمی توان توسط قطری سازی کامل حل کرد. به منظور قطری کردن یک ماتریس توسط رایانه یک روش معمول، سه قطری کردن در گام اول و بعد قطری کردن کامل آن است. یک روش محاسباتی خوب برای بدست آوردن اطلاعات لازم در مورد سیستم ها روش لnkشوز<sup>2</sup> است [1,2,3]. روش لnkشوز به عنوان یک روش کارا و مفید برای سه قطری کردن ماتریس های پراکنده ی بزرگ شناخته شده است که ابزار محاسباتی مفیدی برای مطالعه ی گذار فاز کوانتومی در سیستم های اسپینی است [4,5]. روش لnkشوز روشی است که از تعمیم روش توانی<sup>3</sup> بدست می آید. روش توانی یک روش ساده برای محاسبه ی قدرمطلق بزرگترین ویژه مقدار یک ماتریس است که با یک بردار اختیاری اولیه  $|v_0\rangle$  آغاز می شود و با ضرب مکرر ماتریس  $H$  به ویژه مقدار مورد نظر همگرا می گردد.

---

<sup>1</sup> Sparse  
<sup>2</sup> Lanczos  
<sup>3</sup> Power method

این روش برای سیستم های با شرایط مرزی دوره ای بسیار مفید است. روش لنگشوز در مواد دوره ای هنگامی که تعداد بسیار زیادی از اوربیتال ها در محاسبه در نظر گرفته می شوند، و مواردی که تقارن انتقالی بطور کامل یا جزئی غایب وجود نداشته باشد، که در این صورت مفاهیم و ساده سازی های تئوری بلاخ موثر نیست، بسیار کارا می باشد.

## 2-1 روش لنگشوز

در این فصل به بررسی حل مسائل ویژه مقداری توسط روش لنگشوز خواهیم پرداخت. روش یا الگوریتم لنگشوز به این علت که اساساً یک رویکرد غیر احتمالی در مسائل فیزیکی با جفت شدگی قوی از قبیل سیستم های چند ذره ای بسط فیزیکی ماده چگال می باشد مورد توجه فیزیک دانان قرار گرفته است.

اساس روش لنگشوز بسیار ساده و کلی است. یک سیستم کوانتومی با همیلتونی  $H$ ، و تعداد  $N$  حالت پایه ی عمود بر هم را  $\{|\psi_j\rangle (j=1,2,\dots,m)\}$  در نظر بگیرید. در این روش از هر حالت مفروض  $|v_0\rangle$  متعلق به فضای بسط یافته  $\{\psi_j\}$  می توان آغاز کرد و عملگر همیلتونی را دائماً روی آن اثر داد. این روش نمایش زنجیره ی یک بعدی از سیستم اولیه را فراهم می کند. در این روش از یک بردار اولیه ی اختیاری  $|v_0\rangle$  شروع می کنیم و دائماً عملگر همیلتونی  $H$  را روی آن اثر می دهیم، تا به ویژه بردار مورد نظر ما میل کند. وقتی ویژه مقادیر  $\{E_j\}$  ها و ویژه بردار های  $\{|\psi_j\rangle (j=1,2,\dots,m)\}$  های ماتریس  $m$  بعدی  $H$  مشخص شدند، می توان بردار اولیه را بر حسب شان بسط داد:

$$|v_0\rangle = \sum_{j=1}^m a_j |\psi_j\rangle \quad (1-1)$$

در واقع بردار اولیه ی ترکیبی از ویژه بردارهای ماتریس  $H$  اختیار می گردد.

در نتیجه با  $k$  بار اثر  $H$  روی بردار اولیه  $|v_0\rangle$  به رابطه ی زیر می رسیم:

$$|v_1\rangle = H |v_0\rangle = \sum_{j=1}^m a_j E_j |\psi_j\rangle,$$

$$|v_2\rangle = H^2|v_0\rangle = \sum_{j=1}^m a_j E_j H |\psi_j\rangle = \sum_{j=1}^m a_j E_j^2 |\psi_j\rangle,$$

⋮

$$|v_k\rangle = H^k|v_0\rangle = \sum_{j=1}^m a_j E_j^k |\psi_j\rangle, \quad (2-1)$$

ما به دنبال ویژه مقدری که بیشترین مقدار را دارد هستیم بنابراین:

$$|v_k\rangle = E_1^k a_1 |\psi_1\rangle + \sum_{j=2}^m a_j E_j^k H |\psi_j\rangle, \quad (3-1)$$

می توان نشان داد وزن نسبی ویژه بردار متناظر با ویژه مقدری که بیشترین مقدار را دارد به صورت توانی با  $k$  افزایش می یابد.  $E_1$  بزرگترین ویژه مقدار را دارد.

$$|v_k\rangle = E_1^k [a_1 |\psi_1\rangle + \sum_{j=2}^m a_j \left(\frac{E_j}{E_1}\right)^k H |\psi_j\rangle], \quad (4-1)$$

شتاب همگرایی در روش توانی با تفریق مولفه های قبلی ( $|v_{k-1}\rangle, |v_{k-2}\rangle, \dots$ ) از  $|v_0\rangle$  بهتر می شود. این تفریق از مولفه های قبلی معادل با سه قطری سازی است. حال این موضوع را شرح می دهیم:

اگر فرض کنیم ماتریس  $T$  سه قطری شده ی ماتریس اصلی  $H$  توسط تبدیل  $V$  باشد، رابطه ی زیر را خواهیم داشت:

$$T = V^{-1} H V \quad \text{یا} \quad V T = H V \quad (5-1)$$

$$V = \begin{pmatrix} V_1 \\ V_2 \\ \vdots \\ V_m \end{pmatrix}, \quad T = \begin{pmatrix} \alpha_1 & \beta_1 & 0 & \cdots & 0 & 0 \\ \beta_1 & \alpha_2 & \beta_2 & \cdots & 0 & 0 \\ \vdots & \vdots & & & & \\ 0 & 0 & \cdots & \alpha_{m-1} & \beta_{m-1} \\ 0 & 0 & \cdots & \beta_{m-1} & \alpha_m \end{pmatrix} \quad (6-1)$$

با استفاده از  $H V = V T$  می توان نوشت:

$$H|v_1\rangle = \alpha_1|v_1\rangle + \beta_1|v_2\rangle$$

$$H|v_2\rangle = \beta_1|v_1\rangle + \alpha_2|v_2\rangle + \beta_2|v_3\rangle$$

$\vdots$

$$H|v_{m-1}\rangle = \beta_{m-2}|v_{m-2}\rangle + \alpha_{m-1}|v_{m-1}\rangle + \beta_m|v_m\rangle$$

$$H|v_m\rangle = \beta_{m-1}|v_1\rangle + \alpha_m|v_m\rangle \quad (7-1)$$

از این روابط می توان  $|v_k\rangle$  ها را محاسبه کرد:

$$|v_2\rangle = \frac{(\alpha_1|v_1\rangle - \alpha_1|v_1\rangle)}{\beta_1}$$

$\vdots$

$$|v_m\rangle = \frac{H|v_{m-1}\rangle - \beta_{m-2}|v_{m-2}\rangle + \alpha_{m-1}|v_{m-1}\rangle}{\beta_{m-1}} \quad (8-1)$$

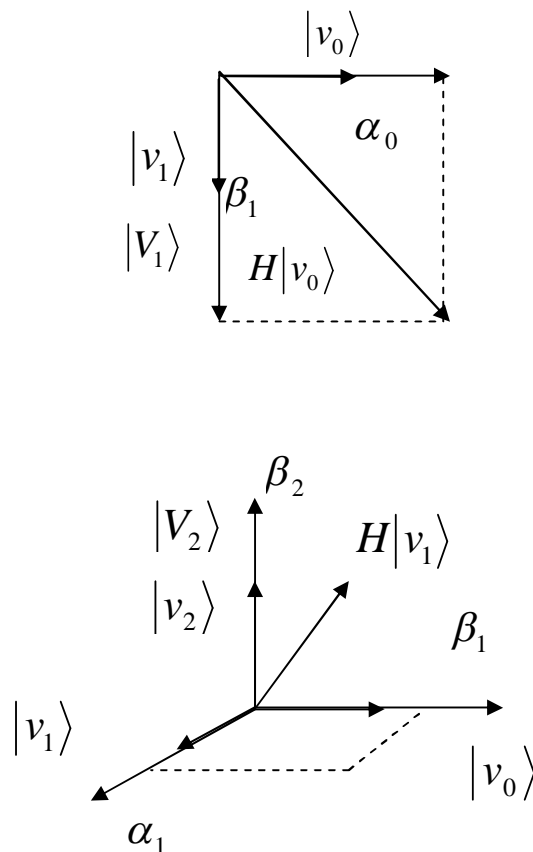
در یک فضای  $m$  بعدی  $m$  بردار می توان یافت که بر هم متعامد باشند، به این منظور کافی است که  $|v_k\rangle$  ها بر یکدیگر عمود باشند. در یک فضای  $m$  بعدی، روابط مربوط به یافتن  $\beta_i$  و  $\alpha_i$  را می توان به شکل زیر نوشت [6]:

$$\alpha_i = \langle v_i | H | v_i \rangle$$

$$\beta_i = \|H|v_i\rangle - \beta_{i-1}|v_{i-1}\rangle - \alpha_i|v_i\rangle\| \quad (9-1)$$

در واقع با یافتن  $\beta_i$  و  $\alpha_i$  می توان شکل سه قطری  $T$  را از  $H$  بدست آورد و در نهایت بعد از سه قطری سازی، قطری سازی توسط یکی از روش های استاندارد انجام می گردد. شکل سه قطری که از  $H$  می سازیم فضای حافظه را به صورت یک مرتبه ی خطی از بعد ماتریس اشغال می کند [7]. که در ادامه توضیح داده می شود.

در این روش در ابتدا، یک بردار اولیه  $|v_0\rangle$  اختیار می کنیم. بردار اولیه ی اختیاری را بر اساس ویژه بردار های ماتریس  $m$  بعدی  $H$  بسط می دهیم.



شکل (1-1). نمایش شماتیکی از روش لنگشوز

عملگر  $H$  را روی حالت اولیه  $|v_0\rangle$  اثر می دهیم. و تصویر حالت اولیه،  $|V_1\rangle$  خواهد بود، بنابراین یک حالت جدید  $|V_1\rangle$  که بر بردار  $|v_0\rangle$  عمود است، را بدست می آوریم. فرآیند متعامد سازی توسط عملگر تصویر  $P_0 = |v_0\rangle\langle v_0|$  انجام می شود. حالت جدید  $|V_1\rangle$  به صورت زیر توصیف می شود:

$$|V_1\rangle = (1 - P_0)H|v_0\rangle = H|v_0\rangle - a_0|v_0\rangle$$

$$a_0 = \langle v_0|H|v_0\rangle \quad (10-1)$$

اکنون حالت  $|V_1\rangle$  را بهنجار می کنیم:

$$b_1^2 = \langle V_1|V_1\rangle, \quad |v_1\rangle = \frac{1}{b_1}|V_1\rangle \quad (11-1)$$

در فرآیند مشابهی ما عملگر  $H$  را روی حالت  $|v_1\rangle$  اعمال می کنیم. در نتیجه برای بدست آوردن  $|V_2\rangle$ ،  $H|v_1\rangle$  عمود بر هر دو حالت  $v_0$  و  $v_1$  می شود. ما داریم:

$$|V_2\rangle = (1 - P_1)(1 - P_0) H|v_1\rangle = (1 - P_1 - P_0)H|v_1\rangle \quad (12-1)$$

$P_1 = |v_1\rangle\langle v_1|$  عملگر تصویر روی حالت  $|v_1\rangle$  را نشان می دهد.

$$|V_2\rangle = H|v_1\rangle - a_0|v_1\rangle - b_1|v_0\rangle, \quad (13-1)$$

$$a_1 = \langle v_1|H|v_1\rangle, \quad b_2^2 = \langle V_2|V_2\rangle \quad \text{and} \quad |v_2\rangle = \frac{1}{b_2}|V_2\rangle \quad (14-1)$$

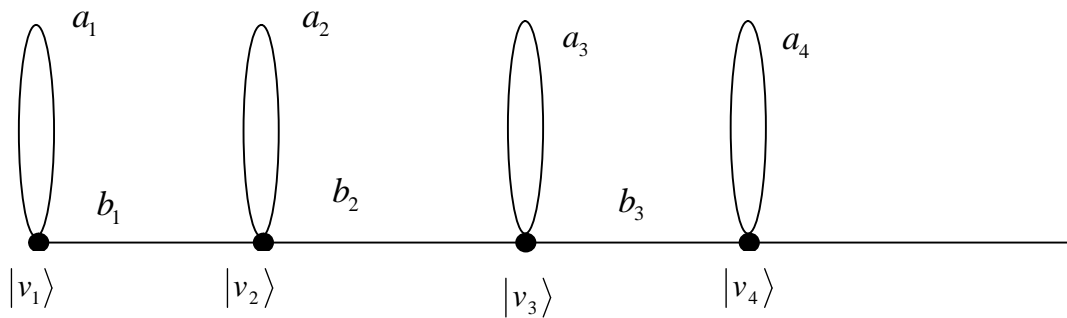
این فرآیند در شکل (1-1) نشان داده شده است.

با توجه به ادامه ی این فرایند به رابطه ی (6) می رسیم که می توان آن را به شکل زیر هم باز نویسی کرد:



$$H = \sum_{n=0}^{\infty} a_n |v_n\rangle\langle v_n| + \sum_{n=0}^{\infty} b_{n+1} [ |v_n\rangle\langle v_{n+1}| + |v_{n+1}\rangle\langle v_n| ] \quad (15-1)$$

که می توان به شکل (2-1) نمایش داد:



شکل (2-1) نمایش شماتیکی زنجیره ی خطی تولید شده در فرآیند لنگشوز

### 3-1 نقاط ضعف روش لنگشوز

با اینکه این روش مناسب است اما اشکالاتی دارد:

- در مقابل خطای گرد کردن ناپایدار است اما برای هدف ما که محاسبه ی تنها چند ویژه مقدار با قدر مطلق بزرگترین مقادیر است، این نوع ناپایداری مشکلی ایجاد نمی کند زیرا این خطا های گرد کردن در اعداد بزرگ دیده نمی شوند و در محاسبات ما محسوس نیست.
- ممکن است تعامد در میان حالت های متوالی از بین برود که این خود باعث بدست آوردن ویژه مقادیر نادرست و حالت های شبح می شود. برای اجتناب از این مسئله باید در حافظه ای بطور مداوم متعامد بودن را بررسی کرد [8,9].

ما انتخاب بردار اولیه را به این صورت انجام می دهیم که یک مولفه ی آن را غیر صفر انتخاب می کنیم. برای ویژه حالت مطلوب که حالت پایه است این روش به خوبی جواب می دهد. اما اگر انتخاب دیگری انجام شود و به حالت پایه نرسیم باید با امتحان و خطا چندین بردار اولیه را آزمود تا اینکه به تراز مطلوب همگرا شود. و همگامی که همگرایی حاصل شد در ادامه این ماتریس سه قطری را توسط یکی از روش های استاندارد قطری می کنیم.

## فصل دوم

# گذار فاز کوانتومی

### 1-2 مقدمه

گذار فاز نقش مهمی را در طبیعت بازی می کند و همگی ما در زندگی روزمره با آن سرو کار داریم. مثلاً هنگامی که برای یک فنجان چای آب را به جوش می آوریم، آب شدن برف در زیر آفتاب بعد از یک شب برفی. نمونه ی دیگر اینکه آهن در میدان مغناطیسی، مغناطیده می شود و هنگامی که آهن را تا  $770\text{ C}^{\circ}$  گرم می کنیم متوجه می شویم که خاصیت مغناطیسی آن از بین می رود. این پدیده های آشنا و فراوان مدت ها تا اواخر قرن نوزدهم پدیده های رازآلودی بودند و به سادگی فهمیده نمی شدند. گذار فاز های پیچیده تری هم از قبیل گذار یک فلز به حالت ابر رسانا در دماهای پایین وجود دارند.

تا اواسط قرن بیستم تئوری قابل قبولی برای فهم سازوکار این گذار فازها وجود نداشت. از آن زمان به بعد با ارائه ی نظریه های گوناگون، جنبه های بسیار زیادی از این پدیده ها شناخته شدند. اواخر سال 1970 گذارهای فازی که در دمای صفر درجه ی کلونین رخ می دهند به عنوان گذار فاز کوانتومی شناخته شدند و مورد توجه فیزیکدانان قرار گرفتند.

## 2-2 گذار فاز

هر ماده ای که می شناسیم می تواند به چندین صورت ممکن در طبیعت وجود داشته باشد. هر کدام از این صورت ها را فاز می نامند. وجود حالت ها و فازهای مختلف در یک ماده، از نتایج شگفت انگیز برهم کنش بین ذرات می باشد. گذار فاز با تغییر پارامترهای خارجی و قابل کنترل در سیستم رخ می دهد که مشخصه ی آن تغییر کیفی در خواص سیستم است. حال به بررسی کیفی گذار فاز در مثال آشنای آب می پردازیم. یخ و آب هر دو شامل مولکول  $H_2O$  هستند. پارامترهای فیزیکی یک تک مولکول های  $H_2O$  و برهم کنش بین جفت مولکو لها را می توان پیدا کرد. با این حال دانستن این اطلاعات ما را برای درک تغییری که در دمای صفر اتفاق می افتد آماده نمی کند!

در دمای پایین تر از صفر درجه سلسیوس، مولکول های  $H_2O$  یخ در شبکه ی بلوری منظم آرایش می یابند و هر مولکول  $H_2O$  به سختی از جای خود منحرف می شود. بالای دمای صفر ما آب مایع داریم، که همه ی مولکول ها آزادانه در سراسر ظرف محتوی مایع، با سرعت زیاد حرکت می کنند. حال این سوال مطرح می شود چگونه  $10^{23}$  مولکول، به صورت هماهنگ تصمیم می گیرند در دمای خاصی حرکت کنند که منجر به گذار فاز از یخ به مایع می شود؟

این گذار فاز توسط تعادل ظریفی که بین انرژی  $E$  و آنتروپی  $S^1$  سیستم درک می شود. خواص ماکروسکوپی یک سیستم را می توان از انرژی آزاد  $F$  یا تابع پارش سیستم بدست آورد. انرژی آزاد  $F$  سیستم در دمای  $T$  به صورت زیر تعیین می شود:

$$F = E - TS \quad (1-2)$$

اصل تعادل ترمودینامیکی سیستم می گوید در تعادل گرمایی، سیستم ها به دنبال مینیمم انرژی هستند. انرژی بر حسب برهمکنش بین مولکول های  $H_2O$  تعیین می شود که در ساختار کریستالی یخ، مینیمم می گردد. آنتروپی که توسط بولتزمن توضیح داده شده درجه ی بی نظمی در یک فاز است، به طور دقیق تر متناسب با لگاریتم تعداد آرایش های میکروسکوپی مولکول های آب در انرژی و حجم مفروض می باشد. واضح است آنتروپی در فاز مایع بزرگتر است. در دمای پایین سهم جمله ی دوم کم می شود و جمله ی انرژی درونی مهم می شود. لذا کم شدن انرژی بر افزایش آنتروپی غلبه کرده و در نتیجه فاز یخ که کمینه انرژی درونی را داراست، حاصل می شود. در دمای بالا سهم آنتروپی اهمیت پیدا می کند و با

---

<sup>1</sup> Entropy

قرارگرفتن مولکول های آب در فاز مایع، انرژی آزاد سیستم کمینه می شود. البته چیزی که تا اینجا توضیح داده شد، توصیفی کیفی درباره ی چگونگی تغییر فازها است. به طور کلی رقابت بین انرژی یک پیکره بندی ( $E$ ) و تعداد یک پیکره بندی (انترپی  $S$ ) منجر به پدیده ی گذار فاز می گردد [13].

گذار فاز بطور معمول به دو نوع گذار فاز مرتبه ی اول و گذار فاز مرتبه ی دوم تقسیم بندی می شود [11,12]. به پدیده هایی که در آنها گذار فاز اتفاق می افتد، پدیده های بحرانی گفته می شود. در 100 درجه ی سانتیگراد، آب جوش می آید و در دمای بالاتر به فاز بخار تبدیل می شود. این نقطه که در آن گذار فاز مایع به فاز بخار توام با تغییر ناگهانی چگالی می باشد نقطه ی گذار نامیده می شود. این نوع گذار که دو فاز در همزیستی با هم هستند گذار فاز مرتبه ی اول نامیده می شود. با افزایش فشار، نقطه ی جوش آب بالاتر رفته و تغییر چگالی در نقطه ی گذار پایین می آید. این عمل تا آنجا ادامه پیدا می کند که در دمای خاص (374 درجه ی سانتیگراد) و فشار (218 اتمسفر) اختلاف چگالی در نقطه ی فاز به صفر می رسد و این نقطه که در آن گذار مایع به بخار با تغییر چگالی توام نیست، نقطه ی بحرانی آب نامیده می شود. این نوع گذار که دو فاز در همزیستی با هم نیستند گذار فاز مرتبه ی دوم نامیده می شود. نمونه ای از گذار فاز مرتبه ی دوم در آهن به عنوان یک ماده ی فرومغناطیس وجود دارد. وقتی از پایین دمای گذار به این نقطه نزدیک می شویم، مغناطش به طور پیوسته به صفر نزدیک می شود. به این نقطه در گذار فاز پیوسته، نقطه ی بحرانی نیز گفته می شود. معمولاً روی سیستم ها در نزدیکی گذار فاز پیوسته متمرکز می شوند [13]. چنین گذاری با یک پارامتر نظم مشخص می گردد. پارامتر نظم تابعی ترمودینامیکی است که در یک فاز مقدار صفر و در فاز بعدی مقدار غیر صفر دارد. مثلاً در گذار فاز فرومغناطیسی، مغناطش کل به عنوان پارامتر نظم تعریف می شود. در بعضی حالت ها پیدا کردن یک پارامتر نظم مناسب بسیار پیچیده است.