

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

تقدیم به پدر و مادر عزیزم

و به همسر خوبم "توماج"

تقدیر و تشکر

سپاس خداوند بزرگ را که در راه پر پیچ و خم زندگی همیشه همراه من بود. خداوندی که حتی در تمامی لحظاتی که از یاد او غافل بودم مرا از یاد نبرد و به من بهترین‌ها را عطا کرد به ویژه پدر و مادری که در تمام زندگی‌ام گام به گام همراه من بودند و در هر قدمی که برداشتم به آنها تکیه کردم. به پاس عشق و محبتی که به من داشتند و برای همه چیز از آنها که بهترین معلم‌های من بوده‌اند و از خواهرانم مهسا و مائده و همچنین از پدر بزرگ و مادر بزرگ عزیزم به خاطر اینکه همیشه مشوق من بوده‌اند سپاسگذارم. از همسر خوب و مهربانم که همیشه بهترین دوست من بوده و هست و در تمامی لحظه‌های خوب و بد همیشه در کنارم بود به خاطر تمامی زحمات‌ها و محبت‌هایش و به خاطر آرامشی که در کنار او دارم و همچنین از خانواده‌ی محترم ایشان به ویژه پدر بزرگوارشان که همیشه مشوق من برای ادامه‌ی تحصیل بوده‌اند به خاطر تمامی حمایت‌هایشان سپاسگذارم.

از تمامی معلمان و دبیران و استادانی که در طی این سال‌ها در خدمتشان بوده‌ام به ویژه از جناب آقای دکتر مهدوی‌فر قدردانی می‌کنم. در طی دو سالی که در خدمت ایشان بودم چیزهای زیادی یاد گرفتم هرچند ایشان شخصیت علمی برجسته‌ای هستند و کار کردن در کنار ایشان فرصت بزرگی برای من بود اما آنچه همیشه از ایشان به یاد خواهم داشت اخلاق، رفتار، متانت و بزرگواری است.

از همه‌ی دوستانی که در طی این دو سال در کنار من بودند از جمله سرکار خانم دکتر ناصری و آقای محمدعلی حاج زمان و خانم هانیه مرادمرد که همیشه به سوالات من با حوصله پاسخ دادند و همچنین از دوستان خوبم در گروه فیزیک به خاطر روزهای خوبی که در کنارشان داشتم سپاسگذارم.

چکیده

مطالعه‌ی اثر دایمرشدگی در مدل زنجیره‌ی وامانده‌ی اسپین- $1/2$

طیبه ندائی

در این پایان نامه، زنجیره‌ی هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین- $1/2$ وامانده‌ی دایمر، مورد مطالعه قرار گرفته است. در این مدل δ پارامتر دایمر برای تبادل نزدیکترین همسایه‌ها و α پارامتر واماندگی برای تبادل دومین نزدیکترین همسایه-هاست. ما نمودار فاز حالت پایه‌ی سیستم هایزنبرگ اسپین- $1/2$ پادفرومغناطیس وامانده‌ی دایمر را در دو زیرفضای $(S_z^{tot} = 0, 1)$ مورد بررسی قرار دادیم. در این مطالعات از روش لنگشوز برای قطری سازی عددی زنجیره‌ی محدود استفاده کردیم و با استفاده از نتایج قطری سازی، توابع پاسخ سیستم را برحسب تابعی از پارامتر واماندگی محاسبه کردیم. براساس نتایج قطری سازی دقیق، همچنین با محاسبه‌ی پارامترهای نظم برای سیستم مورد نظر مشخص شد که اثر دایمرشدگی در مدل زنجیره‌ی وامانده‌ی اسپین- $1/2$ منجر به یک گذار فاز مرتبه‌ی دوم بین دو نوع فاز دایمر، در نقطه‌ی واماندگی بحرانی α_c می‌شود.

کلید واژه: سیستم اسپینی، زنجیره‌ی پادفرومغناطیس هایزنبرگ، روش لنگشوز، واماندگی، دایمرشدگی.

فهرست مطالب

صفحه

عنوان

ح	فهرست شکل‌ها
ذ	چکیده‌ی فارسی
ر	چکیده‌ی انگلیسی
۱	مقدمه

فصل اول: گذار فاز کوانتومی

۵	۱-۱ مقدمه
۶	۲-۱ گذار فاز
۷	۳-۱ گذار فاز کوانتومی
۹	۴-۱ طبقه‌بندی گذارهای فاز
۹	۱-۴-۱ گذار فاز مرتبه‌ی اول
۱۰	۲-۴-۱ گذار فاز مرتبه‌ی دوم
۱۱	۵-۱ رفتار مجانبی در نزدیکی نقطه‌ی بحرانی

فصل دوم: مدل‌های اسپینی

- ۱۴ ----- ۱-۲ مقدمه
- ۱۵ ----- ۲-۲ مغناطیس در یک بُعد
- ۱۷ ----- ۱-۲-۲ قضیه‌ی مرمین واگنر
- ۱۷ ----- ۳-۲ مدل‌های اسپینی
- ۱۸ ----- ۴-۲ مدل هایزنبرگ
- ۲۰ ----- ۵-۲ برهمکنش تبادلی
- ۲۲ ----- ۱-۵-۲ مدل‌های تبادلی
- ۲۳ ----- ۲-۵-۲ تبادل فرومغناطیس
- ۲۷ ----- ۳-۵-۲ تبادل پادفرومغناطیس
- ۲۹ ----- ۶-۲ حالت‌های مختلف هامیلتونی هایزنبرگ
- ۳۰ ----- ۱-۶-۲ زنجیره‌های اسپین- $1/2$ تغییر یافته
- ۳۱ ----- ۷-۲ حل عددی مدل‌های اسپینی

فصل سوم: روش‌های محاسباتی

- ۳۳ ----- ۱-۳ مقدمه
- ۳۴ ----- ۲-۳ مطالعه‌ی سیستم‌ها با سایز محدود
- ۳۵ ----- ۳-۳ سیستم اسپین- $1/2$

۳۶	----- ۱-۳-۳ بُعد فضای هیلبرت
۳۷	----- ۴-۳ روش‌های عددی
۳۸	----- ۵-۳ قطری سازی کامل
۳۹	----- ۶-۳ روش لنگشوز
۴۳	----- ۷-۳ نقاط ضعف لنگشوز

فصل چهارم: مطالعه‌ی زنجیره‌ی اسپینی و امانده در حضور دایمرشدگی

۴۵	----- ۱-۴ مقدمه
۴۵	----- ۲-۴ اثر و اماندگی
۴۹	----- ۳-۴ زنجیره‌ی اسپینی و امانده
۵۱	----- ۴-۴ مدل دایمر
۵۳	----- ۵-۴ زنجیره‌ی اسپینی دایمرشده
۵۴	----- ۶-۴ زنجیره‌ی هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین- $1/2$ و امانده در حضور دایمرشدگی
۵۷	----- ۷-۴ نتایج محاسبات عددی
۵۷	----- ۱-۷-۴ بررسی نمودار فاز حالت پایه با استفاده از روش لنگشوز
۶۴	----- ۲-۷-۴ بررسی فرآیند مغناطش سیستم
۶۵	----- ۳-۷-۴ عامل ساختار اسپینی
۶۸	----- ۴-۷-۴ پارامتر نظم دایمرشدگی

۷۶ ----- ۴-۷-۵ تابع همبستگی نظم رشته‌ای

فصل پنجم: نتیجه‌گیری

۷۸ ----- ۵-۱ نتیجه‌گیری

۸۰ ----- ۵-۲ پیشنهادهایی برای ادامه‌ی کار

۸۱ ----- مراجع

۸۷ ----- پیوست

فهرست شکل‌ها

صفحه	عنوان
۲	شکل (۱۰): نمایش نمادین برهمکنش نزدیکترین همسایه‌ها و برهمکنش دومین نزدیکترین همسایه‌ها
۳	شکل (۲۰): طرح نمادین از زنجیره‌ی اسپینی و امانده‌ی دایمر
۱۲	شکل (۱-۱): طرح کلی نمودار فاز در نزدیکی نقطه‌ی گذار فاز کوانتومی (QCP)
۲۲	شکل (۱-۲): (۱) فرومغناطیس (۲) پادفرومغناطیس
۲۶	شکل (۲-۲): تبادل فرومغناطیس
۲۹	شکل (۳-۲): تبادل پادفرومغناطیس
۴۶	شکل (۱-۴): اسپین‌ها با برهمکنش پاد فرومغناطیس روی شبکه‌ی مثلثی
۴۷	شکل (۲-۴): اسپین‌ها در راستای محور آسان در یک تتراهدرون
۴۸	شکل (۳-۴): وماندگی آسان اسپین‌ها در یک تتراهدرون
۴۸	شکل (۴-۴): مولکول یخ
۵۲	شکل (۵-۴): قید سخت برای مدل دایمر کوانتومی
۵۳	شکل (۶-۴): زنجیره‌ی اسپینی با دایمرشدگی δ

- شکل (۷-۴): تصویر نمادین از برهمکنش‌های پادفرومغناطیس در زنجیره‌ی وامانده‌ی دایمر----- ۵۵
- شکل (۸-۴): شکل نمودار فاز به دست آمده برای زنجیره‌ی اسپین-۱/۲ وامانده‌ی دایمر روی خط $\delta=0$ ----- ۵۶
- شکل (۹-۴): گاف سه‌گانه‌ی زنجیره‌ی وامانده‌ی دایمر برحسب تغییرات واماندگی----- ۵۸
- شکل (۱۰-۴): نمودار فاز حالت پایه‌ی سیستم اسپین-۱/۲ وامانده‌ی دایمر----- ۵۹
- شکل (۱۱-۴): گاف یک‌گانه-سه‌گانه و گاف یک‌گانه-یک‌گانه برای زنجیره‌های وامانده در غیاب دایمرشدگی----- ۶۰
- شکل (۱۲-۴): نمودار گاف یک‌گانه-سه‌گانه (G_{st}) برحسب تغییرات پارامتر واماندگی α ----- ۶۱
- شکل (۱۳-۴): نمودار نسبت گاف یک‌گانه-یک‌گانه به گاف یک‌گانه-سه‌گانه ($R = \frac{G_{ss}}{G_{st}}$) برای زنجیره‌ی وامانده در غیاب دایمرشدگی ($\delta=0$)----- ۶۲
- شکل (۱۴-۴): نمودار نسبت گاف یک‌گانه-یک‌گانه به گاف یک‌گانه-سه‌گانه ($R = \frac{G_{ss}}{G_{st}}$) برای زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر----- ۶۳
- شکل (۱۵-۴): مغناطش جهت‌های x, y, z بر حسب واماندگی α ----- ۶۴
- شکل (۱۶-۴): عامل ساختار اسپینی $S(q=\pi)$ بر حسب تغییرات پارامتر واماندگی α ----- ۶۵
- شکل (۱۷-۴): عامل ساختار اسپینی $S^{xx}(q)$ در $q=\pi$ بر حسب عکس طول زنجیره----- ۶۶
- شکل (۱۸-۴): عامل ساختار اسپینی در جهت‌های x, y, z بر حسب تغییرات q برای زنجیره‌ی وامانده----- ۶۷
- شکل (۱۹-۴): عامل ساختار اسپینی بر حسب تغییرات q برای زنجیره‌ی وامانده‌ی دایمر----- ۶۷
- شکل (۲۰-۴): پارامتر نظم دایمرشدگی روی سایت (۱,۲) بر حسب پارامتر واماندگی در زیرفضای $S_z^{tot}=0$ برای زنجیره‌های اسپینی وامانده----- ۶۹

شکل (۲۱-۴): پارامتر نظم دایمر برای سایت (۱,۳) برحسب پارامتر واماندگی در زیرفضای $S_z^{tot} = 0$ برای زنجیره‌های اسپینی

وامانده----- ۷۰

شکل (۲۲-۴): (a) پارامتر نظم دایمر روی باندهای فرد (b) پارامتر نظم دایمر روی باندهای زوج، در زیرفضای

($S_z^{tot} = 0$) برای زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر----- ۷۱

شکل (۲۳-۴): پارامتر نظم دایمر روی سایت ۱ با ۳ برحسب واماندگی در زیرفضای $S_z^{tot} = 0$ برای زنجیره های وامانده- ۷۲

شکل (۲۴-۴): تقاضل همبستگی‌های دایمر برای زنجیره‌ی وامانده‌ی دایمر در زیرفضای $S_z^{tot} = 0$ ----- ۷۳

شکل (۲۵-۴): پارامتر نظم دایمر روی باندهای فرد در زیرفضای $S_z^{tot} = 1$ برای زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر برحسب پارامتر

واماندگی ----- ۷۴

شکل (۲۶-۴): پارامتر نظم دایمر روی باندهای زوج در زیرفضای $S_z^{tot} = 1$ برای زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر برحسب پارامتر

واماندگی----- ۷۵

شکل (۲۷-۴): پارامتر نظم دایمر روی دومین نزدیکترین همسایه‌ها در زیرفضای $S_z^{tot} = 1$ برای زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر

برحسب پارامتر واماندگی----- ۷۵

شکل (۲۸-۴): $O_{st}^y(1,3)$ همبستگی نظم رشته‌ای در راستای y برای رشته ای که شامل دومین نزدیکترین همسایه است در

زیرفضای $S_z^{tot} = 0$ برای زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر برحسب واماندگی α ----- ۷۶

شکل (۲۹-۴): $O_{st}^y(1,2)$ همبستگی نظم رشته‌ای در راستای y برای رشته ای از باندهای فرد در زیرفضای $S_z^{tot} = 0$ برای

زنجیره‌های وامانده‌ی دایمر برحسب واماندگی α ----- ۷۷

مقدمه

در فیزیک ماده چگال، سیستم‌های اسپینی کوانتومی در ابعاد پایین^۱ به ویژه مواد مغناطیسی در یک بُعد توجه بسیاری از نظریه پردازان را در طول سال‌های اخیر به خود جلب کرده است. بیشترین جذابیت، مربوط به اثرات کوانتومی خالص ناشی از محدود بودن ابعاد در این سیستم‌هاست. از دلایل دیگر اهمیت مواد مغناطیسی در یک بُعد^۲ این است که افت و خیزهای کوانتومی در یک بُعد رفتار سیستم را کنترل می‌کنند. همچنین از نظر تجربی نیز فرصت‌هایی برای مشاهده سیستم‌های یک بُعدی ایجاد شده است. در حدود سال ۱۹۷۰ مشخص شد که مدل‌های یک بُعدی و دو بُعدی که بسیار جذاب بودند ممکن است در طبیعت یافت شوند. اکنون مشخص شده است که سیستم‌های واقعی جالبی وجود دارند که عملاً یک بُعدی هستند یعنی برهم‌کنش رشته‌های یک بُعدی با رشته‌های مجاور ناچیز است.

یکی از این سیستم‌های مورد علاقه زنجیره‌ی پادفرومغناطیس^۳ هایزنبرگ^۴ اسپین- $1/2$ است. در دیدگاه فیزیک نظری، برای توصیف خواص پادفرومغناطیس‌های کوانتومی یک بُعدی مثل حالت پایه یا طیف برانگیختگی، باید از روش‌های عددی و تحلیلی استفاده کنیم [۱]. این روش‌ها، مکمل یکدیگرند و با روش حل دقیق بته-آنزاتس^۵ [۲, ۳, ۴] برای مدل‌های خاص، تعریف نسبتاً کاملی از سیستم‌های کوانتومی کم بُعد، به دست می‌دهند. به خصوص روش‌های نظریه‌ی میدان [۵, ۶] به خوبی برای تقریب رفتار مقیاسی مدل یک بُعدی اسپین- $1/2$ هایزنبرگ [۷] استفاده می‌شوند. انگیزه‌ی اصلی در این مدل‌ها، مطالعه-ی انرژی حالت پایه و محاسبه‌ی گاف اسپینی و بررسی نقاط بحرانی^۶ است که در آنها گذار فاز اتفاق می‌افتد.

¹ Low- dimensional

² One- dimension

³ Antiferromagnetic

⁴ Heisenberg

⁵ Bethe-Anzats

⁶ Critical points

علاوه بر جنبه‌های جذاب نظری، اندازه‌گیری‌های تجربی هم برای تعدادی از مواد شبه یک بُعدی^۱ جالب بوده است. اخیراً زنجیره‌ی هایزنبرگ همسانگرد پادفرومغناطیس اسپین-۱/۲^۲ و امانده‌ی دایمر^۳ برای مطالعات تجربی روی مواد اسپین-پایرلس^۴ مانند [۸] CuGeO_3 و NaV_2O_3 [۹-۱۲] و ترکیب‌های نردبان اسپینی^۵ مانند $\text{Sr}_2\text{Cu}_3\text{O}_5$ یا $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [۱۳-۱۶]، هم بسیار مورد علاقه بوده‌اند. در این راستا، در این پایان‌نامه زنجیره‌ی هایزنبرگ پادفرومغناطیس همسانگرد اسپین-۱/۲ و امانده‌ی دایمر با برهمکنش نزدیکترین همسایه‌ها^۵ (NN) و برهمکنش دومین نزدیکترین همسایه‌ها^۶ (NNN) مورد بررسی و مطالعه قرار گرفته است.



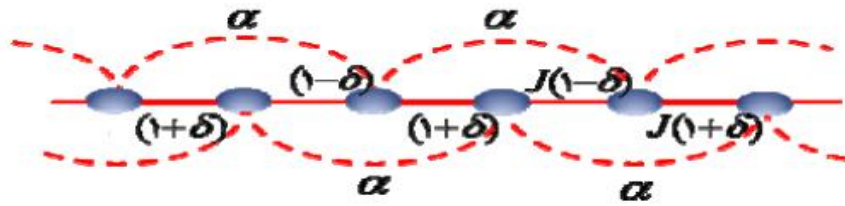
شکل (۱،۰): شکل سمت چپ نمایش نمادین برهمکنش نزدیکترین همسایه‌ها و شکل سمت راست نمایش نمادین برهمکنش دومین نزدیکترین همسایه‌ها است.

همیلتونی زنجیره‌ی مورد نظر با رابطه‌ی زیر تعریف می‌شود:

$$H = \sum_i \{ [1 - (-1)^i \delta] S_i \cdot S_{i+1} + \alpha S_i \cdot S_{i+2} \}, \quad (1,0)$$

در این رابطه ما شرط مرزی دوره‌ای $S_N = S_{N+1}$ را در نظر گرفته‌ایم و N تعداد اسپین‌هایی است که فرض می‌شود زوج باشد. α و δ به ترتیب پارامتر و اماندگی و پارامتر دایمرشدگی هستند و S_i معرف عملگر اسپین روی سایت i ام شبکه است. در شکل (۲-۰) یک طرح نمادین از زنجیره‌ی اسپینی و امانده‌ی دایمر نمایش داده شده است.

¹ Quasi one dimensional
² Frustrated Dimerized
³ Spin-peierls
⁴ Spin-Ladder
⁵ Nearest Neighbor
⁶ Next Nearest Neighbor



شکل (۲-۰): طرح نمادین از زنجیره‌ی اسپینی وامانده‌ی دایمر

برهمکنش تبادلی^۱ بین هر اسپین با نزدیکترین اسپین همسایه‌اش به صورت متناوب از نوع پادفرومغناطیس $(1 + \delta)$ و $(1 - \delta)$ و با دومین نزدیکترین همسایه‌اش با α نشان داده شده است.

مطالعات زیادی با استفاده از روش‌های تحلیلی و عددی روی این مدل انجام شده است. به عنوان مثال روش بوزونیزه کردن^۲ برای تحلیل این سیستم مفید است [۱۷]. اما جزئیات حالت پایه تنها با استفاده از روش‌های عددی به دست می‌آید. روش‌های عددی این امکان را به ما می‌دهند که مقدار واماندگی بحرانی، همچنین جزئیات حالت پایه‌ی سیستم و نیز رفتار گاف برانگیخته را تعیین کنیم [۱۸].

در غیاب دایمرشدگی ($\delta = 0$) مطالعات بسیاری انجام شده است [۱۹-۲۷]. مشخص شده که با افزایش قدرت واماندگی، یک گذار فاز از فاز سیال لاتینجر^۳ بدون گاف ($\alpha < \alpha_c \cong 0.2411$) به فاز دارای گاف دایمر ($\alpha > \alpha_c$) روی می‌دهد [۲۱]. همچنین در نقطه‌ی ماجومدار-گوش^۴ ($\alpha_{MG} = 0.5$)، حالت پایه‌ی این سیستم به طور دقیق مشخص است [۲۸-۳۱]. در غیاب واماندگی ($\alpha = 0$) و دایمرشدگی ($\delta = 0$)، حالت پایه دارای فاز سیال لاتینجر است. اثر پارامتر واماندگی روی حالت پایه‌ی زنجیره‌ی دایمرشده‌ی فوق به طور کامل مشخص نیست [۱۸]. اخیراً در [۱۸] مطالعاتی روی حالت پایه‌ی زنجیره‌ی پادفرومغناطیس همسانگرد اسپین-۱/۲ هایزنبرگ وامانده‌ی دایمر توسط روش گروه بازبهنجارش ماتریس چگالی^۵ [۳۳, ۳۲] انجام شده است.

^۱ Exchange interaction

^۲ Bosonization

^۳ Luttinger Fluid

^۴ Majumdar Ghosh

^۵ Density matrix renormalization Group

هدف اصلی ما نیز در این پایان‌نامه این است که با انجام یک آزمایش عددی توسط روش لَنکَشوز^۱، اثر دایمرشدگی روی حالت پایه‌ی مدل زنجیره‌ی اسپینی وامانده را بررسی کنیم. ابتدا با استفاده از روش عددی لَنکَشوز، هامیلتونی سیستم موردنظر برای زنجیره‌هایی به طول $N = 12, 16, 20, 24$ ذره، قطری شده و طیف انرژی سیستم و حالت پایه‌ی آن تعیین شده است. سپس برای تعیین خواص حالت پایه‌ی سیستم، با محاسبه‌ی توابع همبستگی اسپینی، پارامتر نظم دایمرشدگی^۲ و پارامتر نظم رشته‌ای^۳ به مطالعه‌ی نمودار فاز حالت پایه پرداختیم. با تحلیل داده‌های مربوط به توابع همبستگی فوق، نقاط بحرانی گذار فاز و ویژگی‌های مغناطیسی فازهای مختلف را به دست آورده‌ایم. در نهایت نتایج آزمایش عددی خود را با نتایج به دست آمده از روش‌های تحلیلی و عددی که قبلاً به دست آمده‌اند مقایسه کرده‌ایم.

ساختار این پایان‌نامه شامل پنج فصل است که در فصل اول گذار فاز کوانتومی را معرفی کرده و مفاهیم اساسی گذار فاز را بررسی می‌کنیم. در فصل دوم، روش عددی لَنکَشوز را معرفی می‌کنیم. در فصل سوم، به بررسی مدل‌های اسپینی پرداخته و اساس تعیین برهمکنش تبادلی در مدل‌های اسپینی را مطالعه می‌کنیم. در فصل چهارم، ابتدا به توضیح اثر واماندگی و اثر دایمرشدگی می‌پردازیم سپس مدل زنجیره‌ی اسپینی وامانده را در نظر گرفته و نتایج به دست آمده برای این مدل را مرور می‌کنیم. همچنین نمودار فاز حالت پایه‌ی این مدل در حضور دایمرشدگی را در دو زیرفضای $(S_z^{tot} = 0, 1)$ توسط روش لَنکَشوز، به دست می‌آوریم. در این فصل سعی می‌کنیم با معرفی توابع پاسخ و محاسبه‌ی آنها با روش عددی لَنکَشوز، نقاط بحرانی گذار فاز را به دست آوریم. در نهایت در فصل پنجم، به جمع بندی مطالب و نتیجه‌گیری محاسبات انجام شده می‌پردازیم.

¹ Lanczos method

² Dimerization order parameter

³ String order parameter

فصل اول

گذارهای فاز کوانتومی

۱-۱ مقدمه

گذارهای فاز^۱ نقش بسیار تعیین کننده‌ای در طبیعت دارند. مثال‌های روزمره، مثل جوشیدن آب و تبدیل به بخار، ذوب شدن یخ و تبدیل به مایع و یا در حالت پیچیده‌تر، گذار از یک فلز به حالت ابررسانایی وابسته به دمای پایین، حتی در مورد جهان که چند گذار فاز را پشت سر گذاشته، همانند پلاسمای دمای بالا که تشکیل شده از انفجار بزرگ^۲، سپس سرد شده و تبدیل به جهان حاضر شده است. به چنین تغییراتی در ساختار سیستم، گذار فاز گفته می‌شود. گذارهای فاز توسط یک پارامتر کنترلی خارجی رخ می‌دهند. مشخصه‌ی معمولی و رایج گذارهای فاز در واقع تغییر کیفی در خصوصیات سیستم است. همه‌ی گذارهای فاز مثال زده شده در دمای محدود رخ می‌دهند که در آن نظم ماکروسکوپیکی توسط افت و خیزهای گرمایی ویران می‌شود. به عبارت دیگر افزایش دما باعث به وجود آمدن افت و خیزهای گرمایی می‌شود که این افت و خیزها سبب از بین رفتن نظم ماکروسکوپیکی (مثل ساختار کریستالی یخ در هنگام ذوب شدن) می‌شوند.

^۱ Phase transition

^۲ Big-Bang

برای مدت زیادی، تئوری قابل قبولی برای فهم ساز و کارهای 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. در اواخر سال ۱۹۷۰ نوع دیگری از گذارهای فاز مورد توجه قرار گرفتند. این گذارها که در دمای صفر رخ می دهند با تغییر پارامتر کنترلی غیر حرارتی حاصل می شوند و تاثیر زیادی روی نمودار فاز سیستم های الکترونی می گذارند. این نوع از گذارهای فاز، گذارهای فاز کوانتومی نامیده می شوند که ناشی از رقابت های موجود در فازهای حالت پایه ی سیستم می باشند.

۲-۱ گذار فاز

همه ی سیستم های فیزیکی موجود در طبیعت می توانند به صورت های مختلف در طبیعت وجود داشته باشند. به هر یک از این حالت ها اصطلاحاً یک فاز گفته می شود. کلمه ی فاز یک واژه ی یونانی به معنای (ظاهر) است. در واقع منظور از فاز قسمتی همگن از یک سیستم است. این یکنواختی نه فقط از نظر شیمیایی بلکه شامل حالت های فیزیکی هم می شود. همگن بودن یک فاز به معنای وجود ترکیب شیمیایی معین و دقیق نیست زیرا تغییر ترکیب (به صورت پیوسته) در محلول های مایع یا جامد، ویژگی همگن بودن آنها را از بین نمی برد. هر فاز توسط یک مرز حقیقی، کاملاً از قسمت های دیگر سیستم تفکیک می شود و خواص فیزیکی آن متفاوت از خواص فیزیکی قسمت های دیگر سیستم است. منشا وجود فازهای مختلف در یک ماده، برهمکنش بین ذرات است. به تغییر کیفی در خواص فیزیکی سیستم که در اثر تغییر یک پارامتر خارجی روی می دهد گذار فاز می گویند. همچنین پدیده هایی که در آنها گذار فاز رخ می دهد، پدیده های بحرانی و نقاطی که گذار فاز در آنها اتفاق می افتد نقاط بحرانی نامیده می شوند.

ساده ترین مثال برای بررسی گذار فاز، مولکول آب (H_2O) است. هنگامی که گذار فاز رخ می دهد تنها حالت فیزیکی مواد دستخوش تغییر می شود. از اینرو یخ و آب مایع و بخار آب هر سه شامل مولکول (H_2O) هستند. تفاوت در قدرت برهمکنش بین ذرات باعث به وجود آمدن این حالت های متفاوت شده است. مولکول های یخ (H_2O) در دمای زیر صفر درجه ی سانتی گراد روی نقاط شبکه ی کریستالی منظم قرار دارند و به سختی می توانند از جای خود منحرف شوند. در یک دمای خاص، بالاتر از صفر درجه ی سانتی گراد، مولکول های آب در حالت مایع وجود دارند و می توانند آزادانه در ظرف آب

حرکت کنند. این گذار فاز توسط تعادل بین انرژی E و آنتروپی S^1 سیستم درک می‌شود. به طور کلی رقابت بین انرژی یک پیکربندی (E) و تعداد یک پیکربندی (S) منجر به پدیده‌ی گذار فاز می‌شود [۳۴].

با استفاده از انرژی آزاد F و تابع پارش سیستم می‌توانیم خواص فیزیکی سیستم را به دست آوریم. انرژی آزاد سیستم در دمای T به صورت زیر تعیین می‌شود.

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

طبق اصل تعادل ترمودینامیکی، در تعادل گرمایی سیستم‌ها میل به رسیدن به حداقل انرژی را دارند. انرژی برحسب برهمکنش بین مولکول‌های H_2O تعیین می‌شود که در ساختار کریستالی یخ، کمینه شده است. طبق تعریف بولتزمن^۲ به درجه‌ی بی‌نظمی در یک فاز، آنتروپی گفته می‌شود. آنتروپی متناسب با تعداد آرایش‌های میکروسکوپی مولکول‌های آب در انرژی و حجم مفروض می‌باشد. با توجه به تعریف آنتروپی، هرچه بی‌نظمی بیشتر باشد آنتروپی بیشتر است. بنابراین واضح است که آنتروپی در فاز مایع بزرگتر از فاز یخ است. طبق معادله‌ی (۱-۱) در دمای پایین سهم جمله‌ی دوم کم می‌شود. لذا کاهش انرژی بر افزایش آنتروپی غلبه کرده و انرژی درونی کمینه می‌شود که منجر به تبدیل فاز مایع به فاز یخ می‌شود. در دماهای بالا بی‌نظمی در نتیجه‌ی سهم آنتروپی افزایش می‌یابد و انرژی آزاد کمینه می‌شود.

۳-۱ گذار فاز کوانتومی

در سال‌های اخیر، نوع دیگری از گذارهای فاز تحت عنوان گذارهای فاز کوانتومی مورد توجه قرار گرفته‌اند [۳۵]. این نوع از گذارها به ویژه در فیزیک ماده چگال جذابیت بسیاری پیدا کرده‌اند [۳۵-۳۷]. گذارهای فاز کوانتومی به طور فشرده هم به صورت تئوری [۳۸, ۳۹] و هم به صورت تجربی [۴۰, ۴۱] مورد بررسی قرار گرفته‌اند.

¹ Entropy

² Boltzmann

برای رسیدن به نقطه‌ی گذار، از یک پارامتر کنترلی غیر حرارتی مانند میدان مغناطیسی یا ترکیبات شیمیایی استفاده می‌شود. بنابراین نظم، تنها به وسیله‌ی نوسانات کوانتومی از بین می‌رود. این نوسانات ریشه در اصل عدم قطعیت هایزنبرگ دارند. دلیل اهمیت این دسته از گذارهای فاز این است که دانشمندان معتقدند که وقوع چند گذار فاز در دمای صفر در واقع کلید حل بسیاری از مسایل حل نشده در سیستم‌های ماده چگال (همبسته‌ی قوی) مانند ابررساناهای دمای بالا [۴۲, ۴۳]، ترکیب-های فرمیونی سنگین [۴۴, ۴۵]، گازهای الکترونی دو بُعدی [۳۶, ۴۶] و عایق‌های مغناطیسی نادر [۳۵, ۳۸] است.

تفاوت این فازها در خواص ماکروسکوپیک آنهاست در حالیکه اجزای میکروسکوپیک مشابه‌ای دارند و با گذار فاز کوانتومی از هم جدا شده‌اند. تفاوت اصلی گذارهای فاز کوانتومی که می‌توانند نظم بلندبُرد را در صفر مطلق از بین ببرند با گذارهای فاز دمایی این است که به جای افت و خیزهای گرمایی که از افزایش آنتروپی در دماهای بالای صفر درجه‌ی سانتی‌گراد (دمای محدود)^۱ ناشی می‌شوند، افت و خیزهای کوانتومی که ریشه در اصل عدم قطعیت دارند جایگزین می‌شوند [۳۴]. در ابتدا به نظر می‌رسد که گذار فاز کوانتومی، تنها یک موضوع تئوری است که از نظر تجربی قابل دسترس نیست و کاربردی در فهم مواد طبیعی ندارد زیرا تاکنون امکان سرد کردن مواد تا صفر درجه‌ی سانتی‌گراد (حتی نزدیک به این دما) در آزمایشگاه وجود نداشته است. به ویژه طبق اصل عدم قطعیت، اگر دو عملگر با یکدیگر جابجا نشوند در اندازه‌گیری روی هر کدام از آنها عدم قطعیت وجود دارد که مطابق با افت و خیز است. اصل عدم قطعیت بیان می‌کند تعیین همزمان مکان و تکانه‌ی هر مولکول امکان پذیر نیست.

در دهه‌های اخیر مشخص شده است که گذارهای فاز کوانتومی حتی در دیدگاه تجربی هم، قابل تخمین هستند. به این صورت که در آزمایشگاه رفتار گذار فازهای فیزیکی در دمای متناهی مورد بررسی قرار گرفته و به تدریج میزان دما را تا حد امکان کاهش داده و رفتار فیزیکی حاکم بر سیستم در اثر کاهش دما را مشاهده می‌نمایند. همچنین گذارهای فاز کوانتومی در صفر درجه‌ی کلوین مشخصه‌ای مانند اثر انگشت در خواص، در دمای محدود ($T > 0^\circ K$) بجا می‌گذارند که این اثرها اغلب در دمای اتاق هم به وضوح آشکار می‌شوند. در واقع درک فیزیکی بسیاری از مواد با در نظر گرفتن رابطه‌ی فازها با حالت پایه‌ی سیستم و گذارهای فاز کوانتومی به دست می‌آید.

^۱ Finite-temperature

گذارهای فاز کوانتومی در مورد سیستم‌های همبسته مطالعه می‌شوند. بهترین نمونه‌ها از گذارهای فاز کوانتومی در مواد مغناطیسی از قبیل (فرومغناطیس‌ها و پاد فرومغناطیس‌ها) در دمای پایین دیده شده است که هیچ مشابه‌ای در گذارهای فاز کلاسیک در دمای محدود ندارند. وقتی با گذار فاز کوانتومی سر و کار داریم همواره به دنبال حالت‌های کوانتومی با انرژی حالت پایه (پایین ترین انرژی کل) هستیم.

۴-۱ طبقه‌بندی گذارهای فاز

در گذارهای فاز، پتانسیل شیمیایی فازها و به تبع آن انرژی آزاد گیبس^۱ باید به طور پیوسته تغییر کند. اما تغییرات فاز را به اعتبار رفتار مشتق‌های تابع گیبس به دو دسته‌ی گذار فاز مرتبه‌ی اول و گذار فاز مرتبه‌ی دوم (گذار پیوسته) تقسیم می‌کنند [۴۸, ۴۷].

۱-۴-۱ گذار فاز مرتبه‌ی اول

گذارهایی که با یک تغییر ناپیوسته‌ی حالت (مشتق‌های اول ناپیوسته برای تابع گیبس) متناظرند، گذارهای فاز مرتبه‌ی اول نامیده می‌شوند [۴۹]. حالت‌هایی که گذار فاز مرتبه‌ی اول بین آنها اتفاق می‌افتد در ناحیه‌های جداگانه‌ای از فضای آرایش ترمودینامیکی قرار دارند و کاملاً متمایز از یکدیگرند. این نوع از گذارهای فاز دارای گرمای نهان هستند [۵۰].

در گذار فاز مرتبه‌ی اول، دو یا چند فاز می‌توانند با یکدیگر همزیستی داشته باشند. مثال روشن در این مورد، مثال آشنای آب است. یخ و آب در صفر درجه‌ی سانتی‌گراد یا بخار و آب در صد درجه‌ی سانتی‌گراد با یکدیگر همزیستی دارند. در دمای بالاتر از صد درجه‌ی سانتی‌گراد، آب مایع به فاز بخار تبدیل می‌شود. این نقطه‌ی که در آن گذار فاز مایع به بخار با تغییر ناگهانی چگالی همراه است، نقطه‌ی گذار نامیده می‌شود. این نوع گذارها که در آنها دو یا چند فاز در همزیستی با هم هستند، گذار فاز مرتبه‌ی اول نامیده می‌شود.

¹ Gibbs free energy