

بِسْمِ اللَّهِ الرَّحْمَنِ الرَّحِيمِ

وزارت علوم، تحقیقات و فناوری
دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه
گاوزنگ - زنجان



گذارهای فاز کوانتومی در مدل بلوم-کپل

پایان نامه دکتري

مجيد عابدي

استاد راهنما: استاد محمدرضا خواجه پور

بهمن ۱۳۹۲

تشکر و قدردانی

از خانواده عزیزم، پدر و مادرم تشکر می‌کنم. از شب‌نم عزیز که در مراحل پایانی همراه من بوده است تشکر می‌کنم.

از استاد راهنمای پایان‌نامه جناب آقای دکتر خواجه‌پور کمال تشکر را دارم. از جناب آقای دکتر ثبوتی و جناب آقای دکتر خواجه‌پور برای بنیان‌گذاری این دانشگاه و فراهم آوردن محیط علمی مناسب کمال تشکر را دارم. از کارمندان و اساتید دانشگاه تحصیلات تکمیلی تشکر می‌کنم. از دوستان عزیزم در دانشگاه به خصوص در گروه کوهنوردی برای همراهی ایشان متشکرم.

چکیده

گذارهای فاز کوانتومی زنجیره اسپینی مدل بلوم-کپل در یک میدان عرضی در ناحیه گذار فاز پیوسته و نقطه بحرانی سه‌گانه بررسی شده است. برای به دست آوردن رفتار بحرانی سیستم از سلسله تقریب‌های میدان متوسط و از روش نابهنجاری هماهنگ استفاده شده است. برای سنجش درستی روش‌ها، تمام روش‌ها ابتدا برای مدل آیزینگ در میدان عرضی آزمون شده‌اند. به ازای ضریب میدان کریستالی $0/3$ که یک نقطه گذار فاز پیوسته است، نماهای بحرانی پذیرفتاری، مغناطش خودبخودی و مغناطش بحرانی به دست آمده به ترتیب برابر است با $1/76 \pm 0/01$ ، $\beta_x = 0/126 \pm 0/005$ و $\delta_x = 15/1 \pm 0/1$. این نماها مطابق نگاشت کوانتوم-کلاسیک با نماهای آیزینگ دوبعدی در دمای نامتناهی تطابق دارد. علاوه بر رفتار بحرانی گذار فاز پیوسته، نقطه بحرانی سه‌گانه و نماهای مربوط به این نقطه به دست آمده است. آنچه به دست آمده نشان می‌دهد در بهترین تقریب نقطه سه‌گانه در $D_t^* = 0/88 \pm 0/01$ و $h_{xt}^* = 0/47 \pm 0/01$ واقع می‌شود. نماهای بحرانی این گذار فاز در زنجیره اسپینی برای اولین بار محاسبه شده است و برابر هستند با $1/28 \pm 0/03$ ، $\beta_{xt} = 0/03 \pm 0/03$ و $\delta_{xt} = 23 \pm 5$. این محاسبات نشان می‌دهد که قضیه نگاشت کوانتوم-کلاسیک در نقطه بحرانی سه‌گانه نیز صادق است.

واژه‌های کلیدی: گذار فاز کوانتومی، سیستم‌های اسپینی، مدل بلوم-کپل، نقطه بحرانی سه‌گانه

فهرست

| | | |
|------|--|-------|
| چهار | چکیده | |
| ۱ | پیش‌گفتار | |
| ۳ | ۱ گذار فاز کوانتومی | |
| ۳ | ۱.۱ مقدمه | |
| ۴ | ۲.۱ گذار فاز در دمای متناهی | |
| ۱۱ | ۳.۱ گذار فاز کوانتومی | |
| ۱۷ | ۴.۱ مثال گذار فاز کوانتومی، مدل آیزینگ در میدان عرضی در دمای صفر | |
| ۲۰ | ۵.۱ مشاهدات تجربی گذار فاز کوانتومی سیستم‌های مغناطیسی | |
| ۲۲ | ۶.۱ نگاشت کوانتومی-کلاسیک گذار فاز | |
| ۲۷ | ۲ بسط لاندائو و نظریه‌های میدان متوسط | |
| ۲۷ | ۱.۲ بسط لاندائو | |
| ۳۲ | ۲.۲ نماهای بحرانی در نظریه لاندائو | |
| ۳۵ | ۳.۲ نظریه‌های میدان متوسط | |
| ۳۶ | ۱.۳.۲ تقریب تک‌خوشه‌ای | |
| ۴۵ | ۲.۳.۲ تقریب دو خوشه‌ای | |

| | | |
|----|-------|--|
| ۴۷ | ۳ | مدل آیزینگ در میدان عرضی، نقاط بحرانی |
| ۴۷ | ۱.۳ | تقریب تک خوشه‌ای |
| ۴۸ | ۱.۱.۳ | تقریب وایس |
| ۴۹ | ۲.۱.۳ | تقریب اوگوشی |
| ۴۹ | ۳.۱.۳ | تقریب تک خوشه‌ای با خوشه به طولهای مختلف |
| ۵۲ | ۲.۳ | تقریب دو خوشه‌ای |
| ۵۹ | ۴ | مدل بلوم-کپل، نقاط بحرانی |
| ۵۹ | ۱.۴ | معرفی مدل بلوم-کپل |
| ۶۰ | ۲.۴ | تقریب تک خوشه‌ای |
| ۶۱ | ۱.۲.۴ | تقریب وایس |
| ۶۲ | ۲.۲.۴ | تقریب اوگوشی |
| ۶۳ | ۳.۲.۴ | تقریب تک خوشه‌ای با خوشه به طولهای مختلف |
| ۶۷ | ۳.۴ | تقریب دو خوشه‌ای |
| ۷۳ | ۵ | روش نابهنجاری هماهنگ |
| ۷۵ | ۱.۵ | رابطه نمای بحرانی دقیق سیستم با نمای نابهنجاری |
| ۷۸ | ۲.۵ | محاسبه نمای نابهنجار |
| ۸۲ | ۳.۵ | نماهای بحرانی مدل آیزینگ در میدان عرضی |
| ۸۴ | ۴.۵ | نمای بحرانی گذار فاز پیوسته در مدل بلوم-کپل |
| ۸۵ | ۵.۵ | تقریب تک-خوشه‌ای |
| ۸۸ | ۶.۵ | تقریب دو خوشه‌ای |
| ۹۱ | ۷.۵ | نقطه بحرانی سه‌گانه |

| | | |
|-----|-------|---|
| ۹۷ | ۶ | روش گروه بازبهنجارش ماتریس چگالی |
| ۹۸ | ۱.۶ | الگوریتم RG عددی در یک بعد، مدل آیزینگ در میدان عرضی |
| ۱۰۲ | ۲.۶ | DMRG ، انتخاب حالت‌ها از روی ماتریس چگالی |
| ۱۰۷ | ۳.۶ | الگوریتم DMRG برای سیستم‌های یک بعدی با اندازه نامحدود |
| ۱۰۹ | ۴.۶ | الگوریتم DMRG برای سیستم‌های یک بعدی متشکل از L سایت (اندازه محدود) |
| ۱۱۰ | ۵.۶ | نتایج محاسبات مدل بلوم-کپل |
| ۱۱۱ | ۶.۶ | به دست آوردن نمای بحرانی سیستم با DMRG |
| ۱۱۵ | ۷ | درهم‌تنیدگی |
| ۱۱۶ | ۱.۷ | تعریف درهم‌تنیدگی |
| ۱۱۹ | ۲.۷ | درهم‌تنیدگی در سیستم‌های اپتیکی |
| ۱۲۲ | ۳.۷ | درهم‌تنیدگی در سیستم‌های اسپینی |
| ۱۲۶ | ۱.۳.۷ | مدل آیزینگ در میدان عرضی |
| ۱۲۸ | ۲.۳.۷ | درهم‌تنیدگی در مدل بلوم-کپل |
| ۱۳۸ | آ | روش توانی محاسبه حالت پایه |
| ۱۴۱ | ب | کدهای برنامه DMRG |
| ۱۵۲ | ج | اسکرپت‌های بسته ALPS در python |
| ۱۵۴ | د | استفاده از تکنیک DMRG برای محاسبه حالت پایه در روش نابهنجاری هماهنگ |
| ۱۵۴ | ۱.د | استفاده از DMRG و نابهنجاری هماهنگ |
| ۱۵۵ | ۱.۱.د | گذار فاز پیوسته |
| ۱۵۹ | ۲.د | نقطه بحرانی سه‌گانه |

لیست تصاویر

- ۱.۱ نمودار فاز یک فرومغناطیس ۵
- ۲.۱ توابع ترمودینامیکی به دست آمده از راه حل انزاگر برای آیزینگ در دو بعد. ۸
- ۳.۱ حالت پایه و اولین حالت برانگیخته. (الف) در حالتی که دو جمله H_1 و H_2 با یکدیگر جابجا شوند، با افزایش پارامتر جفتدگی در نقطه‌ای دو تراز همدیگر را قطع می‌کنند. در این حالت تلاقی ترازها رخ می‌دهد. (ب) در حالتی که دو جمله با یکدیگر جابجا نشوند تلاقی تراز اجتناب شده رخ می‌دهد. ۱۲
- ۴.۱ نمودار انرژی حالت پایه و اولین حالت برانگیخته. خط مربوط به حالتی است که اندازه شبکه محدود است و خط‌چین مربوط به حد بینهایت اندازه شبکه است. در اندازه محدود تابع انرژی حالت پایه، یک تابع تحلیلی است؛ بنا بر این هیچ گذار فازی رخ نمی‌دهد. اما گاف انرژی در اطراف $g_c \approx g$ به کمترین مقدار می‌رسد. کمینه مقدار گاف انرژی لزوماً در $g = g_c$ واقع نمی‌شود بلکه با افزایش اندازه سیستم، محل وقوع کمینه گاف به $g = g_c$ نزدیکتر می‌شود و از سوی دیگر مقدار گاف کاهش می‌یابد. تا اینکه در حد بینهایت دو نمودار در نقطه $g = g_c$ بر هم مماس می‌شوند. ۱۳

- ۵.۱ دیاگرام فاز در نزدیکی نقطه بحرانی. محور افقی مربوط به پارامتری است که در دمای صفر باعث گذار فاز می‌شود. محور عمودی دما است. همواره خطی وجود دارد که از نقطه گذار فاز $g = g_c$ آغاز می‌شود و در جایی محور عمودی را قطع می‌کند. خاصیت این خط این است که در هر مقدار از g ، در بالاتر از این خط سیستم به دلیل افزایش دما در حالت غیرمنظم قرار می‌گیرد. حال بسته به اینکه این خط روی محور افقی بیفتد و یا بالای آن قرار گیرد دو شکل (الف) و (ب) ایجاد می‌شود. در شکل (الف) گذار فاز تنها در دمای صفر اتفاق می‌افتد، به عبارت دیگر هرگونه افت و خیز دمایی باعث می‌شود سیستم به حالت نامنظم برود. در شکل (ب) غیر از نقطه بحرانی در دمای صفر، گذار فاز در دمای محدود رخ می‌دهد و همواره یک گذار فاز کلاسیکی است. با تغییرات پارامتر بحرانی و دما، سه ناحیه منظم دمایی، بحرانی کوانتومی و نامنظم کوانتومی در دیاگرام فاز ایجاد می‌شود. ۱۵
- ۶.۱ مغناطش طولی بر حسب میدان عرضی رسم شده است. قبل از نقطه بحرانی دو جواب کاملاً متقارن وجود دارد. در نقطه بحرانی سیستم مغناطش طولی سیستم به یکباره صفر می‌شود. شمای کلی نمودار برای سیستم‌های مختلف کم و بیش مشابه است اما مقدار نقطه بحرانی به بعد سیستم بستگی دارد. ۱۹
- ۷.۱ نمودار فاز کریستال LiHoF_4 به دست آمده توسط بیتکو و همکارانش [۱۱] . . ۲۲
- ۱.۲ نحوه تغییر تابع انرژی آزاد بر حسب پارامتر نظم در گذار فاز پیوسته ۲۹
- ۲.۲ نحوه تغییر تابع انرژی آزاد بر حسب پارامتر نظم در گذار فاز مرتبه اول ۳۰
- ۳.۲ نقطه بحرانی سه‌گانه، در نمودار فاز سیستم ۳۱
- ۴.۲ نواحی بحرانی اطراف نقطه بحرانی سه‌گانه ۳۴

- ۵.۲ تقریب وایس (الف) در یک بعد و (ب) در دو بعد. همسایه‌ها با رنگ نارنجی و اسپین منفرد با رنگ قرمز مشخص شده است. تعداد همسایه‌ها در یک بعد برابر
- ۳۷ ۲ و در دو بعد برابر ۴ است.
- ۶.۲ نمودار رابطه ۲۵.۲ برای سه حالت ممکن رسم شده است. در حالت اول $T < T_c$ ، دو منحنی $y = m$ و $y = \tanh(\beta q J m)$ در سه نقطه همدیگر را قطع می‌کنند. در $T = T_c$ این معادله تنها یک جواب دارد ولی دو نمودار بر همدیگر مماس هستند.
- ۳۸ در $T > T_c$ تنها جواب بدیهی مساله یعنی $m = 0$ وجود دارد.
- ۷.۲ تقریب اوگوشی (الف) در یک بعد و (ب) در دو بعد. همسایه‌ها با رنگ نارنجی و
- ۳۹ دو اسپین منفرد با رنگ قرمز مشخص شده است.
- ۸.۲ تقریب میدان متوسط برای خوشه دلبخواه (الف) در یک بعد و (ب) در دو بعد. همسایه‌ها با رنگ نارنجی و اسپین‌های خوشه مورد نظر با رنگ قرمز مشخص شده
- ۴۰ است.
- ۹.۲ یک خوشه با ۸ اسپین و برهم‌کنش آیزینگ. (الف) در در حالتی که هیچ برهم‌کنشی با خارج از خوشه نداشته باشد و (ب) در حالتی که اسپین‌های مرزی آن تحت اثر
- ۴۳ میدان مؤثر باشند؛ مقدار میدان مؤثر از رابطه خودسازگاری به دست می‌آید.
- ۱۰.۲ مغناطش یک خوشه با ۸ اسپین و برهم‌کنش آیزینگ. (الف) در در حالتی که هیچ برهم‌کنشی با خارج از خوشه نداشته باشد و (ب) در حالتی که اسپین‌های مرزی آن
- ۴۴ تحت اثر میدان مؤثر خودسازگار باشند.
- ۱۱.۲ نحوه تاثیر میدان مؤثر بر اسپین‌های مرزی در تقریب دوخوشه‌ای.
- ۱.۳ نحوه همگرایی مقدار به دست آمده از خوشه‌های مختلف در تقریب تک خوشه‌ای برای مدل آیزینگ $\frac{1}{2}$. (جدول ۱.۳) منحنی درجه ۳ با روش کمترین مربعات به
- ۵۱ نقاط برازش داده شده است.

- ۲.۳ نحوه همگرایی مقدار میدان بحرانی به دست آمده از خوشه‌های مختلف در تقریب دوخوشه‌ای. در هر نمودار طول یکی از خوشه‌ها ثابت نگاه داشته شده و طول خوشه دیگر تغییر کرده است و بر آن منحنی درجه ۳ برازش داده شده است. ۵۷
- ۱.۴ مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی عرضی برای مدل بلوم-کپل در $D = 0.3$ برای خوشه‌های با طول مختلف در تقریب بته. ۶۴
- ۲.۴ مربع مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی عرضی در مجاورت نقطه بحرانی برای مدل بلوم-کپل در $D = 0.3$ برای خوشه $N = 9$ ، در تقریب تک خوشه‌ای. ۶۵
- ۳.۴ مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی نظم دهنده بسیار کوچک برای مدل بلوم-کپل در $D = 0.3$ برای خوشه با طول $N = 9$ در نزدیکی نقطه بحرانی به دست آمده از تقریب تک خوشه‌ای. ۶۷
- ۴.۴ گاف انرژی بین اولین حالت برانگیخته و حالت پایه در مدل بلوک-کپل به ازای $D = 0.3$ برای خوشه‌های با طول مختلف بر حسب میدان عرضی ۶۸
- ۵.۴ گاف انرژی بین اولین حالت برانگیخته و حالت پایه در نقطه بحرانی برای خوشه‌های با طول مختلف برای مدل بلوم-کپل به ازای $D = 0.3$ این نقاط متناظر با کمینه نمودارهای شکل ۴.۴ است. r^2 ضریب رگرسیون است. ۷۰
- ۶.۴ همگرایی نقاط به دست آمده از تقریب بته برای نقطه بحرانی سه گانه برای مدل بلوم-کپل. ۷۱
- ۷.۴ تفاوت انرژی اولین حالت برانگیخته و حالت پایه مدل بلوم-کپل بر حسب میدان مغناطیسی عرضی ۷۲
- ۱.۵ بستگی دمایی گرمای ویژه مدل آیزینگ دو بعدی که با روش‌های مختلف به دست آمده است. (a) نتایج میدان متوسط براگ و ویلیامز. (b) تقریب بته. (c) کرامرز-وانیر. (d) جواب دقیق انزاگر [۲۳]. ۷۴

- ۲.۵ نمودار پذیرفتاری برحسب میدان عرضی در تقریب دو خوشه‌ای و به ازای جفت خوشه‌های متفاوت؛ مدل بلوم-کپل به ازای $D = ۰/۳$ [۵۶]. یک پوش تمام خانواده منحنی‌ها را در بر می‌گیرد که طبق نظریه نابهنجاری هماهنگ رفتار واقعی سیستم نامحدود خواهد بود. ۷۶
- ۳.۵ نمودار مقیاس‌بندی مانده‌ها برای مدل آیزینگ عرضی $S = \frac{1}{p}$ برای خوشه‌های $(۲, ۳), (۳, ۴), \dots, (۹, ۱۰)$ ۸۴
- ۴.۵ (I) رفتار مجذور مغناطش با میدان عرضی در تقریب بته برای خوشه $N = ۷$ (II) رفتار مکعب مغناطش در $h_x = h_{xc}$ با میدان طولی در تقریب بته برای خوشه $N = ۷$ (III) رفتار معکوس پذیرفتاری با میدان عرضی در تقریب بته برای خوشه $N = ۷$ در نزدیکی نقطه بحرانی. ۸۵
- ۵.۵ برونمایی نقاط بحرانی به دست آمده از خوشه‌های مختلف با منحنی درجه دوم. مقدار میدان بحرانی به ازای خوشه بینهایت و یا $\rightarrow ۰$ به دست می‌آید $h_{xc}^* = \frac{1}{N}$ ۸۷
- ۶.۵ نمودار لگاریتمی مانده مغناطش خودبخودی در خوشه‌های مختلف بر فاصله از میدان بحرانی دقیق در مدل بلوم-کپل به ازای $D = ۰/۳$ ۸۸
- ۷.۵ نمودار لگاریتمی مانده مغناطش بحرانی در عدم میدان مغناطیسی طولی در خوشه‌های مختلف بر فاصله از میدان بحرانی دقیق در مدل بلوم-کپل به ازای $D = ۰/۳$ ۸۹
- ۸.۵ نمودار لگاریتمی مانده پذیرفتاری مغناطیسی در خوشه‌های مختلف بر فاصله از میدان بحرانی دقیق. ۹۰
- ۹.۵ مقادیر میدان عرضی بحرانی به دست آمده با استفاده از تقریب دو خوشه‌ای بر حسب عکس اندازه خوشه دوم-برازش با روش کمترین مربعات و با منحنی درجه چهار انجام شده است. ۹۱

- ۱۰.۵ رفتار بحرانی در نقطه بحرانی سه گانه در تقریب تک خوشه ای به ازای $N = 3$.
- ۹۲ نمودار $m_s^4 - h_x$ ، $m_c^5 - h_z$ و $\frac{1}{\chi} - h_x$
- ۱۱.۵ نمودار لگاریتمی مانده مغناطش خودبخودی در نقطه بحرانی سه گانه بر حسب فاصله
- ۹۳ از نقطه بحرانی دقیق.
- ۱۲.۵ نمودار لگاریتمی مانده پذیرفتاری در نقطه بحرانی سه گانه بر حسب فاصله از نقطه
- ۹۴ بحرانی دقیق.
- ۱۳.۵ نمودار لگاریتمی مانده مغناطش بحرانی در نقطه بحرانی سه گانه بر حسب فاصله از
- ۹۵ نقطه بحرانی دقیق.
- ۱.۶ یک زنجیره اسپینی یک بعدی که از کنار هم قرار گرفتن تعداد زیادی بلوک مشابه
- ۹۸ تشکیل شده است.
- ۲.۶ تبدیل دو بلوک مشابه به یک بلوک جدید. با تبدیل دو بلوک کنار هم به یک بلوک
- ۹۹ می توان از تعداد درجات آزادی سیستم کاست.
- ۱۰۱ تبدیل دو بلوک متفاوت به یک بلوک جدید.
- ۴.۶ روش ابداعی وایت برای کاهش درجات آزادی. در این روش با قطری کردن یک
- ابریلوک با ۴ بلوک، و پیدا کردن ماتریس چگالی برای سیستم دو بلوک AB ، دو بلوک
- به بلوک جدید A' تبدیل می شود. سپس ابریلوک جدید از کنار هم قرار گرفتن دو
- بلوک وسطی ابریلوک قبلی $(B و C)$ ، بلوک جدید در سمت چپ و تصویر آن در
- ۱۰۲ سمت راست تشکیل می شود.

- ۵.۶ نحوه همگرایی انرژی هر سایت در مدل آیزینگ عرضی در میدان عرضی $h_x = 1$ که از تکرار الگوریتم DMRG به دست می‌آید. جواب دقیق این مدل برابر $\frac{4}{\pi}$ است. همانطور که مشاهده می‌شود پس از تکرار ۱۰۰ باره الگوریتم با نگاه داشتن ۱۶ حالت در هر مرحله به جایی می‌رسیم که جوابها به صورت خطی با عکس تعداد سایت تغییر می‌کند. خطایی که به دست می‌آید $10^{-6} \times 5/8$ است. ۱۰۷
- ۶.۶ این دو شکل، نمایی از نحوه تغییرات بلوک‌ها در الگوریتم با سایز نامحدود و الگوریتم با سایز نامحدود را نشان می‌دهد. ۱۰۹
- ۷.۶ مغناطش در مدل بلوم-کپل با $D = 0.3$ به دست آمده از ۸۰ بار تکرار الگوریتم DMRG برای سیستم با اندازه نامحدود. با ۸۰ بار اجرا، الگوریتم به حالت پایدار می‌رسد. ۱۱۲
- ۸.۶ نمودار لگاریتمی مغناطش بر حسب فاصله از میدان عرضی بحرانی. نقاط به دست آمده از DMRG و خط برازش داده شده بر آن. ۱۱۳
- ۹.۶ نمودار لگاریتمی مغناطش بحرانی بر حسب میدان طولی. نقاط به دست آمده از DMRG و خط برازش داده شده بر آن. ۱۱۴
- ۱۰.۷ اتم سه‌ترازه با جفتیدگی بالا. ۱۲۰
- ۲.۷ آنتروپی بر حسب زمان با شدت‌های مختلف میدان لیزر در پیکربندی جفتیدگی تراز پایین. ۱۲۱
- ۳.۷ اتم سه‌ترازه با جفتیدگی پایین. ۱۲۲
- ۴.۷ آنتروپی بر حسب زمان با شدت‌های مختلف میدان لیزر در پیکربندی جفتیدگی تراز بالا. ۱۲۳
- ۵.۷ آنتروپی ماتریس چگالی کاهش یافته سایت شماره ۴ در یک خوشه ۸ تایی، مدل آیزینگ عرضی. ۱۲۶

- ۶.۷ کانکارس و نگاتیویته همسایه اول. سایت شماره ۴ و ۵ در یک خوشه ۸ تایی ، مدل آیزینگ در میدان عرضی. همانطور که مشاهده می‌شود در اینجا این دو نمودار بر هم منطبق شده‌اند. ۱۲۷
- ۷.۷ مشتق کانکارس همسایه اول. سایت شماره ۴ و ۵ در یک خوشه ۸ تایی ، مدل آیزینگ عرضی. ۱۲۸
- ۸.۷ نمودار لگاریتمی λ_m بر حسب طول خوشه ، مدل آیزینگ عرضی. ۱۲۹
- ۹.۷ کانکارس همسایه دوم ، مدل آیزینگ عرضی. طول خوشه ۸ و کانکارس بین سایت ۴ و ۶ رسم شده است. ۱۳۰
- ۱۰.۷ نگاتیویته همسایه اول در خوشه‌های به طول‌های مختلف، مدل بلوم-کپل $D = 0.3$ ۱۳۱
- ۱۱.۷ مشتق کانکارس همسایه اول در خوشه‌های به طول‌های مختلف، مدل بلوم-کپل $D = 0.3$ ۱۳۲
- ۱۲.۷ نمودار نقطه کمینه مشتق کانکارس همسایه اول بر عکس طول خوشه، مدل بلوم-کپل $D = 0.3$ ۱۳۳
- ۱۳.۷ نمودار لگاریتمی نقطه کمینه مشتق نگاتیویته همسایه اول λ_m بر طول خوشه، مدل بلوم-کپل $D = 0.3$ ۱۳۴
- ۱۴.۷ نمودار لگاریتمی مقدار کمینه مشتق کانکارس همسایه اول بر طول خوشه، مدل بلوم-کپل $D = 0.3$ ۱۳۵
- ۱.د نحوه همگرایی میدان بحرانی به دست آمده از تقریب بته با الگوریتم DMRG برای مدل بلوم-کپل با $D = 0.3$ ۱۵۶
- ۲.د نمودار مجذور مغناطش بر حسب میدان عرضی برای خوشه‌های مختلف به دست آمده از تقریب بته با استفاده از الگوریتم DMRG برای مدل بلوم-کپل $D = 0.3$ ۱۵۷

- ۳.د نمودار لگاریتمی مانده‌های مغناطش خودبخودی در خوشه‌های مختلف بر حسب
 ۱۵۹ $D = ۰/۳$ کیل بلوم- در مدل سیستم در نقطه بحرانی دقیق سیستم در مدل بلوم- کیل با $D = ۰/۳$
- ۴.د نمودار مکعب مغناطش بر حسب میدان طولی برای خوشه‌های مختلف به دست
 ۱۶۰ آمده از تقریب بته با استفاده از الگوریتم DMRG برای مدل بلوم- کیل $D = ۰/۳$
- ۵.د نمودار لگاریتمی مانده‌های مغناطش بحرانی در خوشه‌های مختلف بر حسب فاصله
 ۱۶۱ از نقطه بحرانی دقیق سیستم در مدل بلوم- کیل با $D = ۰/۳$
- ۶.د نمای چهارم مغناطش بر حسب میدان مغناطیسی. همانطور که مشخص است به
 ازای تغییرات کوچک D رفتار این کمیت به کلی تغییر می‌کند. در پایین‌تر از نقطه
 بحرانی سه‌گانه ($D < D_t$) رفتار به وضوح خطی نیست، در بالاتر از نقطه بحرانی
 $D > D_t$ رفتار در $h_x < h_{xt}$ خطی است ولی یک گاف وجود دارد. تنها در نقطه
 ۱۶۲ بحرانی سه‌گانه است که هم رفتار خطی است و هم این گاف وجود ندارد.
- ۷.د نحوه همگرایی D و h_{xt} مربوط به نقطه بحرانی سه‌گانه مدل بلوم کیل به دست آمده
 ۱۶۲ از خوشه‌های با طول مختلف.
- ۸.د مغناطش در نزدیک نقطه بحرانی مدل بلوم- کیل با $D = ۰/۳$ به دست آمده از
 ۱۶۳ DMRG
- ۹.د مانده مغناطش خودبخودی در نقطه سه‌گانه مدل بلوم- کیل با $D = ۰/۳$ بر حسب
 فاصله از نقطه بحرانی دقیق به دست آمده از، DMRG طول خوشه‌ها ۲۶، ۱۴، ۱۱، ۸، ۵
 ۱۶۴ و ۲۸ است.
- ۱۰.د مانده مغناطش بحرانی در نقطه سه‌گانه مدل بلوم- کیل با $D = ۰/۳$ بر حسب فاصله
 از نقطه بحرانی دقیق به دست آمده از، DMRG طول خوشه‌ها ۲۶، ۱۴، ۱۱، ۸، ۵
 ۱۶۵ و ۲۸ است.

پیش‌گفتار

مفهوم گذار فاز، یکی از مفاهیمی است که از زمان پیدایش و شکل‌گیری ترمودینامیک، همواره مورد توجه دانشمندان به خصوص در رشته فیزیک بوده است. گذار فاز کلاسیک و گذار فاز کوانتومی دو بخش مهم تشکیل دهنده انواع گذار فاز هستند که در تاریخ فیزیک مورد توجه قرار گرفته‌اند.

بین این دو نوع گذار فاز تشابهات و تفاوت‌هایی وجود دارد. یکی از تشابهات، رفتار یکسان کمیت‌های مختلف در نزدیکی نقطه بحرانی در هر کدام از این دو نوع گذار فاز است. این تشابه را می‌توان در قالب مفهوم نگاشت کوانتوم-کلاسیک بیان کرد. از تفاوت‌های مهم نیز می‌توان به نقش درهم‌تنیدگی در گذار فاز کوانتومی اشاره کرد که مشابه آن در گذار فاز کلاسیک موجود نیست.

در این پایان‌نامه به ارائه مفاهیم مختلف مربوط به گذار فاز کوانتومی در مدل بلوم-کیل پرداخته شده است. این پایان‌نامه در ۷ فصل و ۴ پیوست نگاشته شده است. در فصل اول به معرفی گذار فاز کلاسیک و گذار فاز کوانتومی و نحوه نگاشت آنها پرداخته می‌شود. در فصل دوم به معرفی دسته‌ای از تقریب‌ها با نام میدان متوسط در قالب تک خوشه‌ای و دو خوشه‌ای و نیز معرفی نظریه لاندائو پرداخته می‌شود و پیش‌بینی این تقریب از رفتار کمیت‌ها در نزدیکی نقطه گذار فاز بررسی می‌شود. فصل سوم به مدل آیزینگ در میدان عرضی و ارائه نتایج نقطه بحرانی به دست آمده برای این مدل اختصاص یافته است. در ادامه و در فصل چهارم مدل بلوم-کیل که یک مدل اسپین-۱ است، معرفی شده است و نتایج نقطه بحرانی و نقطه بحرانی سه‌گانه در آن به دست آمده است.

در فصل پنجم نظریه نابهنجاری هماهنگ، برای به دست آوردن رفتار بحرانی دقیق سیستم از رفتار سلسله تقریب‌های میدان متوسط معرفی شده است. سپس نتایج تقریب‌های مختلف و رفتار بحرانی سیستم‌ها در مدل آیزینگ در میدان عرضی و مدل بلوم-کیل ارائه شده است. در این فصل رفتار و نماهای بحرانی این سیستم‌ها به دست آمده است. در فصل ششم روش DMRG معرفی شده است و

مورد استفاده قرار گرفته است. روش DMRG یکی از روش‌هایی است که کارایی خود را در مورد سیستم‌های یک بعدی به خوبی به اثبات رسانده است. در فصل آخر مفهوم درهم‌تنیدگی معرفی شده است و در مدل آیزینگ و مدل بلوم-کپل به اختصار بررسی شده است و رفتار مقیاس‌بندی آنها و ارتباط آن با نقطه بحرانی به دست آمده است.

این پایان‌نامه همچنین شامل ۴ پیوست است. در پیوست اول روش توانی محاسبه حالت پایه که یک روش عددی است به اختصار بیان شده است. در پیوست دوم، کدهای برنامه نوشته شده برای روش DMRG آمده است تا بتواند مورد استفاده خواننده قرار گیرد؛ نوشتن برنامه برای این روش از پیچیدگی‌های خاصی برخوردار است. پیوست سوم به اسکریپت‌های مورد استفاده در ALPS اختصاص دارد که می‌تواند برای خواننده مفید باشد. در پیوست چهارم روشی که تلفیقی از DMRG و روش نابهنجاری هماهنگ است ارائه شده است و نتایج آن به دست آمده است.

فصل اول

گذار فاز کوانتومی

۱.۱ مقدمه

ماده انباشته در طبیعت می‌تواند به حالت‌های مختلف وجود داشته باشد. آب، به عنوان مثال، به صورت مایع، جامد (یخ) و گاز (بخار آب) یافت می‌شود. هر کدام از این حالت‌ها یک فاز نامیده می‌شود. گذار فاز به معنی تغییر از فازی به فاز دیگر است. ذوب شدن یخ و بخار شدن آب بارزترین نمونه‌های گذار فاز در طبیعت هستند. این گذار با تغییر دما اتفاق می‌افتد. در تمام انواع گذار فاز، تغییر از فازی به فاز دیگر با تغییر در یک پارامتر رخ می‌دهد.

بررسی علمی پدیده گذار فاز، با شکل‌گیری علم ترمودینامیک مورد توجه قرار گرفت. در اواخر قرن نوزدهم مطالعه نظام‌مند این پدیده‌ها به کمک توابع ترمودینامیکی فرمول‌بندی شدند [۱]. با پیدایش نظریه جنبشی گازها و مکانیک آماری تعادل به عنوان اساس میکروسکوپی ترمودینامیک، بررسی این پدیده‌ها وارد مرحله جدیدی شد. در مکانیک آماری تعادل، تمام خواص ماکروسکوپی سیستم از تابع پارش یا از انرژی آزاد به دست می‌آیند. معمولاً وقتی سیستم از فازی به فاز دیگر می‌رود لازم است

که توابع پاسخ سیستم که مشتقات مرتبه دوم انرژی آزاد هستند دچار تغییرات عمده گردند. گذار فاز وقتی رخ می‌دهد که انرژی آزاد یا یکی از مشتقات آن تکینه شوند. گذار فازی که در آن مشتق مرتبه اول انرژی آزاد ناپیوسته باشد، گذار فاز ناپیوسته (مرتبه اول) نامیده می‌شود. گذار فازهایی که مشتق مرتبه اول در آنها پیوسته باشد و تکینگی در مشتقات دوم ظاهر شود، گذار فاز پیوسته (گذار فاز مرتبه دوم) نامیده می‌شوند.

۲.۱ گذار فاز در دمای متناهی

آنچه در پدیده گذار فاز مشاهده می‌شود، تغییر عمده‌ای در خواص ماده در یک نقطه خاص است. همانند آنچه در گذار فاز گاز-مایع مشاهده می‌شود، در مواد مغناطیسی نیز گذار فاز مشاهده می‌شود. نمودار فاز یک ماده فرومغناطیس ساده در شکل ۱.۱ رسم شده است.

گذار فاز را می‌توان با یک کمیت که پارامتر نظم سیستم^۱ نامیده می‌شود متناظر کرد. پارامتر نظم یک کمیت ترمودینامیکی است که مقدار آن در هر فاز فرق می‌کند و بنا بر این می‌تواند برای تمیز دادن فاز سیستم به کار رود. پارامتر نظم معمولاً چنان اختیار می‌شود که در یک فاز صفر باشد و در فاز دیگر مخالف صفر. در گذار فاز مایع به گاز اختلاف چگالی به عنوان پارامتر نظم در نظر گرفته می‌شود. در سیستم‌های مغناطیسی مغناطش به عنوان پارامتر نظم در نظر گرفته می‌شود که برای سیستمی متشکل از N «اسپین» با رابطه زیر تعریف می‌شود:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i s_i^z \quad (1.1)$$

که در آن N ، تعداد «اسپین»های سیستم است و جمع روی تمام «اسپین»ها بسته شده است. «اسپین»

^۱ order Parameter