بسم الله الرحمن الرحیم

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

گذارهای فاز کوانتومی در مدل بلوم- کپل

پایان‌نامهٔ دکتری

مجید عابدی

استاد راهنما: **استاد محمدرضا خواجه‌پور**

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 پایان نامه 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 ۰/۳ که یک نقطه گذار فاز پیوسته است، نماهای بحرانی پذیرفتاری، مغناطش خودبخودی و مغناطش بحرانی به دست آمده به ترتیب برابر است با $\gamma_x = ۱٫۷۶ \pm ۰٫۰۱$ ، $\beta_x = ۰٫۱۲۶ \pm ۰٫۰۰۵$ و $\delta_x = ۱۵٫۱ \pm ۰٫۱$. این نماها مطابق نگاست 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 $D_t^* = ۰٫۸۸ \pm ۰٫۰۱$ و $h_{xt}^* = ۰٫۴۷ \pm ۰٫۰۱$ واقع می‌شود. نماهای بحرانی این گذار فاز در زنجیره اسپینی برای اولین بار محاسبه شده است و برابر هستند با $\gamma_{xt} = ۱٫۲۸ \pm ۰٫۰۳$، $\beta_{xt} = ۰٫۰۳ \pm ۰٫۰۳$ و $\delta_{xt} = ۲۳ \pm ۵$. این محاسبان 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

لیست تصاویر

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-کپل پرداخته شده است. این پایان نامه 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 لانداؤ پرداخته می‌شود و پیش بینی 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-کپل 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-کپل 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 کارآیی 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 پایان نامه 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 پیچیدگی های خاصی برخوردار است. پیوست سوم به اسکریپت های 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 ماکروسکوپیک 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:

$$m = \frac{1}{N} \sum_i s_i^z \tag{۱.۱}$$

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

[۱] order Parameter