

به نام خداوند بخشنده و مهربان



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک

# بررسی حالت پایه وردشی RVB در شبکه‌های دوبعدی مربعی و لانه‌زنبوری به روش شبیه‌سازی مونت کارلوی کوانتومی

زهرا نوربخش

استاد راهنما : دکتر فرهاد شهبازی

اسفند ۸۶



دانشگاه صنعتی اصفهان  
دانشکده فیزیک

پایان نامه کارشناسی ارشد رشته فیزیک

تحت عنوان

بررسی حالت پایه وردشی RVB در شبکه‌های دو بعدی مربعی و لانه زنبوری به روش شبیه‌سازی

مونت کارلوی کوانتمی

توسط

زهرا نوربخش

در تاریخ ۱۳۸۶/۱۲/۱۵ توسط کمیته تخصصی زیر مورد بررسی و تصویب نهایی قرار گرفت.

دکتر فرهاد شهبازی

۱- استاد راهنمای پایان نامه

دکتر سید اکبر جعفری

۲- استاد مشاور پایان نامه

دکتر محمدعلی شاهزمانیان

۳- استاد مدعو

دکتر کیوان آقابابایی سامانی

۴- استاد داور داخلی

دکتر ظفر الله کلانتری

سرپرست تحصیلات تکمیلی

## تشکر و قدر دانی

شکرو سپاس خدای را که اولین معلم بشر است و انسان را به لباس تقوا و ادب زینت داد و به زبور علم و دانش مزین ساخت.

بعد از این، بر خود وظیفه می دانم از

مادر فداکار و پدر مهربانم به خاطر آموزشها، پندها و زحمات بی دریغشان،

اساتید ارجمندم دکتر فرهاد شهبازی و دکتر سید اکبر جعفری و همه‌ی اساتید دانشکده به خاطر آنچه از ایشان آموختم،

اساتید گرامی دکتر محمدعلی شاهزمانیان و دکتر کیوان سامانی که نکات ارزنده‌ای را در افزایش کیفیت این اثر خاطر نشان کردند،

دوستان عزیزم که در این دوره صمیمانه در کنارم بودند

و زحمات تمامی کارکنان دانشکده فیزیک که در ایجاد محیطی دوستانه سهیم هستند،

مراتب تشکر و قدردانی خود را به عمل آورم. برای همگی سرافرازی و شادکامی را آرزومندم.

زهرا نوربخش

اسفند ۸۶

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

تقدیم به

پویندگان راه علم و معرفت

# فهرست مندرجات

۲	مدل هایزنبرگ	۱
۲	مدل های اسپینی	۱-۱
۳	اصل طرد، برهم کنش تبادلی و مدل هایزنبرگ	۲-۱
۷	مدل هابارد و برهم کنش پادفرومغناطیس هایزنبرگ	۳-۱
۷	مدل هابارد در $\langle n \rangle = 1$ و حد $U \gg t$	۱-۳-۱
۹	حالت پایه مدل هایزنبرگ	۴-۱
۹	حالت پایه فرومغناطیس، $J > 0$	۱-۴-۱
۱۰	حالت پایه پادفرومغناطیس، $J < 0$	۲-۴-۱
۱۳	پیوند ظرفیتی تشدیدی (RVB)	۲
۱۳	سیستم های مغناطیسی ناکام	۱-۲

۱۵	..... نظریه RVB	۲-۲
۱۷	..... تابع موج RVB	۳-۲
۲۰	..... همبستگی اسپینی در فاز RVB	۴-۲
۲۲	..... موفقیت‌های نظریه RVB	۵-۲
۲۶	محاسبات عددی	۳
۲۶	..... محاسبه‌ی عددی به روش مونت کارلو	۱-۳
۲۷	..... روش متروپلیس	۲-۳
۲۸	..... تابع موج لیانگ، داکوت، اندرسون	۳-۳
۲۹	..... الگوریتم متروپلیس	۴-۳
۳۱	..... شرایط دوره‌ای	۵-۳
۳۳	حالت پایه RVB در شبکه مربعی	۴



۳۴	.....	تابع موج کوتاه برد	۱-۴
۳۷	.....	تابع موج بلند برد	۲-۴
۴۰		حالت پایه RVB در شبکه لانه زنبوری	۵
۴۱	.....	تابع موج کوتاه برد	۱-۵
۴۴	.....	تابع موج بلند برد	۲-۵
۴۹		برانگیختگی در فاز RVB	۶
۵۰	.....	همبستگی اسپینی در فاز برانگیخته	۱-۶
۵۲	.....	برانگیختگی در شبکه مربعی	۲-۶
۵۶	.....	برانگیختگی در شبکه لانه زنبوری	۳-۶
۵۹		بحث و نتیجه گیری	۷
۶۱		از هابارد تا هایزنبرگ	A
۶۱	.....	تبدیل کانونیک	۱-A
۶۳	.....	مدل $t-J$	۲-A

۶۸ ..... از BCS تا RVB ۱-B

۶۸ ..... ترکیبات ابرسانای دمای بالا ۲-B

## چکیده

این پایان نامه با هدف بررسی امکان وجود RVB به عنوان حالت پایه مدل هایزنبرگ با برهم کنش پادفرو مغناطیس و  $S = \frac{1}{2}$  در شبکه های مربعی و لانه زنبوری در هفت فصل تنظیم شده است. در فصل اول نشان می دهیم چرا از برهم کنش پادفرو مغناطیس در سیستم کوانتومی انتظار نظم نیل نداریم. لذا علاقه مند به بررسی این مدل با روش های دیگر هستیم، بر این اساس در فصل دوم تابع موج وردشی RVB را معرفی می کنیم و با استفاده از الگوریتم متروپلیس که در فصل سوم توضیح داده ایم انرژی حالت پایه و همبستگی اسپینی را برای حالت های مختلف تابع موج RVB در شبکه مربعی و لانه زنبوری حساب می کنیم (فصل چهارم و پنجم). با استفاده از همبستگی اسپینی مغناطش را تعیین می کنیم و پیدایش نظم در سیستم در حالتی غیر از حالت نیل را نشان می دهیم. در فصل ششم، انرژی حالت برانگیخته سه گانه ( $S = 1$ ) در شبکه مربعی و لانه زنبوری را حساب می کنیم و طبق انتظارمان بی گاف بودن انرژی در  $k = 0$  را به دست می آوریم.

# فصل ۱

## مدل هایزنبرگ

واژه‌ی کلیدی این پایان‌نامه RVB<sup>۱</sup> است. ما تابع موج وردشی RVB را به عنوان حالت پایه سیستم‌های همسانگرد اسپینی دو بعدی با اسپین  $S = 1/2$ ، و برهم‌کنش پادفرو مغناطیس بین نزدیکترین همسایه‌های مطالعه می‌کنیم. در این فصل به عنوان یادآوری یا مقدمه به توضیح مدل هایزنبرگ، اهمیت این مدل و اثرات و خیزهای کوانتومی می‌پردازیم.

### ۱-۱ مدل‌های اسپینی

مدل هایزنبرگ از جمله مدل‌هایی است که برای بررسی وجود نظم بلندبرد، گذار فاز، تعیین و تحلیل نقطه بحرانی و ... در سیستم‌های مغناطیسی کوانتومی و کلاسیک کاربرد دارد. هامیلتونی مدل هایزنبرگ به صورت زیر است:

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \quad (1-1)$$

که پارامتر نظم این مدل،  $\langle \bar{S} \rangle$ ، دارای ۳ درجه آزادی است. به این ترتیب مدل هایزنبرگ در گروه تقارنی  $O(3)$  قرار دارد یا به عبارت دیگر مدل هایزنبرگ نسبت به دوران ناورد است. از جمله مدل های اسپینی دیگری می توان از مدل  $XY$  با هامیلتونی  $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j$  و دو درجه آزادی برای اسپین (گروه تقارنی  $O(2)$ ) و مدل آیزینگ با هامیلتونی  $H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i S_j$  و یک درجه آزادی برای اسپین (گروه تقارنی  $Z_2$ ) نام برد. در مدل آیزینگ پارامتر نظم گسسته است و اسپین می تواند دو جهت  $\downarrow$  یا  $\uparrow$  را اختیار کند.

پیوسته بودن پارامتر نظم در مدل هایزنبرگ باعث می شود افت و خیزهای گرمایی یا افت و خیزهای کوانتومی ناشی از اصل عدم قطعیت هایزنبرگ راحت تر بتوانند نظم سیستم را به هم بزنند. به عنوان مثال، در مقایسه ی مدل هایزنبرگ با پارامتر نظم پیوسته و مدل آیزینگ با پارامتر نظم گسسته، مدل هایزنبرگ کوانتومی در یک بعد حتی در دمای صفر مطلق بی نظم است [۱]. در دو بعد و دمای بزرگ تر از صفر نیز مدل هایزنبرگ بی نظم است و افت و خیزهای گرمایی مانع ایجاد نظم بلند برد در سیستم است [۲]. اما مدل آیزینگ در دو بعد و در یک بعد در دمای صفر منظم است.

در این پایان نامه ما مدل هایزنبرگ با برهم کنش پادفرومغناطیس ( $J < 0$ ) و  $S = 1/2$  را در شبکه های دو بعدی مربعی<sup>۲</sup> و لانه زنبوری<sup>۳</sup> و در دمای صفر مطلق مورد بررسی قرار می دهیم و وجود نظم بلند برد در سیستم را تحقیق می کنیم.

## ۱-۲ اصل طرد، برهم کنش تبادلی و مدل هایزنبرگ

منشاء برهم کنش هایزنبرگ از کجاست؟ پادفرو یا فرومغناطیس بودن را چه چیز تعیین می کند؟ و شدت جفت شدگی  $J$ ، از چه مرتبه ی بزرگی است؟

در پاسخ به این سوالات از اتم هلیم به عنوان ساده ترین سیستم فیزیکی که برهم کنش الکترونی در آن

<sup>۲</sup> square lattice

<sup>۳</sup> honeycomb lattice

موجود است کمک می‌گیریم [۳].

اتم هلیم از یک هسته با بار دو ( $z = 2$ ) و دو الکترون که آنها را با ۱ و ۲ نشانه گذاری می‌کنیم تشکیل شده است. این دو الکترون همدیگر را دفع می‌کنند و هسته آنها را جذب می‌کند.

چون این دو الکترون فرمیون‌های یکسان هستند باید تابع موج کل تحت جایگشت مختصات فضایی و اسپینی پاد متقارن باشد. در حالت پایه هر دو الکترون در لایه ۱s قرار دارند بنابراین تابع موج اسپینی پاد متقارن است. در اولین حالت برانگیخته یکی از این دو الکترون به لایه دوم گذار می‌کند بسته به اینکه

تابع موج فضایی متقارن است یا نه تابع موج اسپینی در حالت یگانه<sup>۴</sup>

$$P_{1,2}\chi = -\chi \Rightarrow \psi = |\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle \quad (2-1)$$

یا سه گانه<sup>۵</sup>

$$P_{1,2}\chi = \chi \Rightarrow \chi = |\uparrow\uparrow\rangle \quad (3-1)$$

$$\chi = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$\chi = |\downarrow\downarrow\rangle$$

قرار می‌گیرند. بنابراین مسئله مهم تعیین اختلاف انرژی این دو حالت است.

هامیلتونی اتم هلیم به صورت زیر است:

$$H = \frac{P_1^2 + P_2^2}{2m} - \frac{ze^2}{r_1} - \frac{ze^2}{r_2} + \frac{e^2}{|r_1 - r_2|} \quad (4-1)$$

برای تعیین انرژی باید مقدار چشم‌داشتی هامیلتونی را در حالت‌های یگانه و سه گانه محاسبه کنیم.

$$\Psi_s = \frac{1}{\sqrt{2}}[\phi_1\phi_2 \pm \phi_1\phi_2]\chi_s \quad (5-1)$$

$$E = \langle \Psi | H | \Psi \rangle$$

---

singlet ۴

triplet ۵

$$= E^0 + e^2 \int \int \frac{|\phi_1(r_1)|^2 |\phi_2(r_2)|^2}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2 \pm e^2 \int \int \frac{\phi_1^*(r_1) \phi_2^*(r_2) \phi_2(r_1) \phi_1(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2$$

دیده می‌شود جابجایی انرژی از دو جمله تشکیل شده است: جمله اول شکل آشنای برهم‌کنش الکتروستاتیکی میان دو ابر الکترونی است. جمله دوم تعبیر کلاسیک ندارد، منشاء آن در اصل طرد پاولی است و علامت آن بستگی به این دارد که اسپین حالت صفر است یا یک. به علت وجود این سهم تبدلی حالت‌های یگانه و سه‌گانه واگن نیستند

$$E_{\uparrow\uparrow} - E_{\uparrow\downarrow} = -2J_{1,2} \quad (6-1)$$

$$J_{1,2} = e^2 \int \int \frac{\phi_1^*(r_1) \phi_2^*(r_2) \phi_2(r_1) \phi_1(r_2)}{|r_1 - r_2|} dr_1 dr_2$$

این اختلاف انرژی را که تنها وابسته به اسپین است، می‌توانیم به صورت تابعی از اسپین بنویسیم. به این ترتیب که:

$$S^2 = S_1^2 + S_2^2 + 2S_1 \cdot S_2$$

$$\Rightarrow (2S_1 \cdot S_2 + \frac{1}{4})_s = \mp 1 \quad (7-1)$$

و هامیلتونی را می‌توان به صورت زیر نوشت که شکل آشنای هامیلتونی هایزنبرگ است.

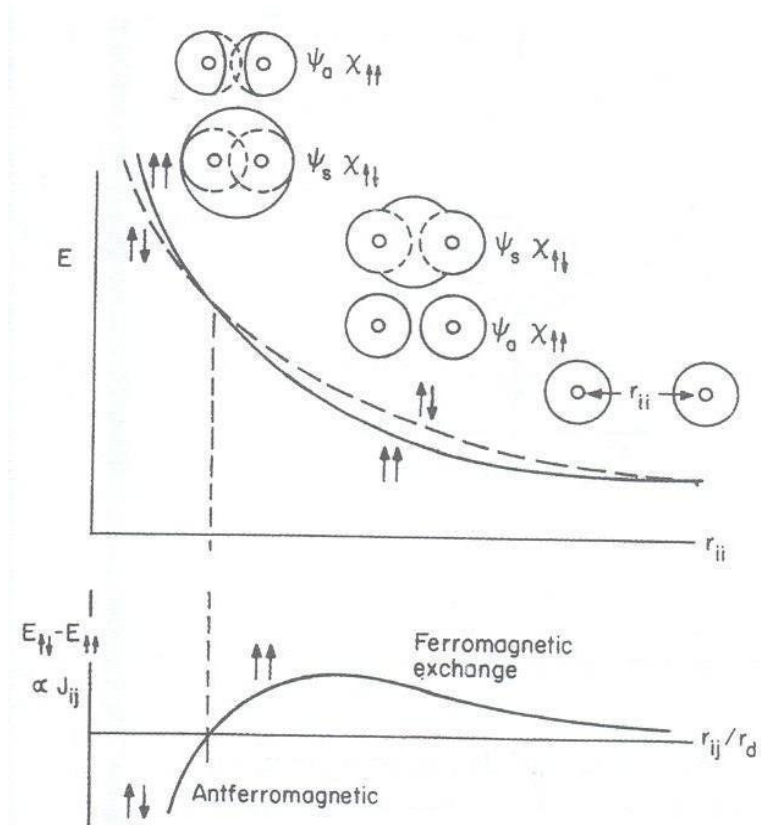
$$H = \frac{E_s + E_t}{2} - \frac{E_s - E_t}{2} (2S_1 \cdot S_2 + 1/2)$$

$$H = -2J_{1,2} S_1 \cdot S_2 + constant \quad (8-1)$$

و چنانچه هایزنبرگ<sup>۶</sup> برای اولین بار متوجه شد، برهم‌کنش تبدلی که از همان مرتبه برهم‌کنش کولنی باعث پدیده‌ی فرومغناطش در مواد است.

البته  $J$  شدیداً با فاصله افت می‌کند. اگر  $J$  مثبت باشد سیستم فرومغناطیس و اگر منفی باشد سیستم

پادفرومغناطیس است.



شکل (۱-۱): نمودار موسوم به "Bethe-Slater curve". شکل بالایی، وابستگی انرژی حالت یگانه و سه‌گانه‌ی اسپینی (اسپین‌ها مربوط به اوربیتال  $d$  هستند) نسبت به فاصله‌ی بین اتمی  $r_{i,j}$  را نشان می‌دهد. شکل پایینی، چگونگی وابستگی  $J$  به  $\frac{r_{i,j}}{r_d}$  را نشان می‌دهد که در آن شعاع اوربیتال  $d$  است. می‌بینیم در فاصله‌های نزدیک اتمی که الکترون‌ها اجازه‌ی نزدیک شدن به یکدیگر را دارند و تابع موج الکترونی متقارن است، اصل طرد پاولی باعث می‌شود تابع موج اسپینی پادمتقارن باشد و انرژی حالت یگانه از حالت سه‌گانه کمتر باشد و  $J < 0$ .

تعیین علامت  $J$  و محاسبه‌ی آن انتگرال کار ساده‌ای نیست. اصولاً مدل هایزنبرگ برای بررسی خواص مغناطیسی سیستم عایق به‌کار می‌رود که توابع موج جایگزیده‌اند و  $J$  به شدت با فاصله افت می‌کند و تقریب نزدیک‌ترین همسایه‌ها تقریب مناسبی به‌شمار می‌آید. علامت  $J$  شدیداً به نوع پیوند و ساختار بلوری بستگی دارد. نمودار (۱-۱) چگونگی وابستگی  $J$  به نوع و طول پیوند را نشان می‌دهد [۴].



## ۱-۳ مدل هابارد و برهم کنش پادرومغناطیس هایزنبرگ

هامیلتونی مدل هابارد<sup>۷</sup> که بر پایه دید میکروسکوپی سیستم بس ذره‌ای دارای الکترون‌های ۳d است، بنا شده است به صورت زیر است:

$$H = - \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{i,j} [c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}] + U \sum_i n_{i\uparrow} n_{i\downarrow} \quad (9-1)$$

$$n_{i\sigma} = c_{i,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}, \quad \sigma = \uparrow, \downarrow$$

که در آن  $c$  عملگر فنا و  $c^\dagger$  عملگر خلق الکترون است و  $n$  چگالی موضعی الکترون در سایت  $i$  ام را نشان می‌دهد و  $0 \leq \langle n \rangle \leq 2$ .

$t_{i,j}$  دامنه پرش الکترون<sup>۸</sup> از سایت  $i$  ام به سایت  $j$  ام (نزدیکترین همسایه) را نشان می‌دهد و معمولاً برای همسایه‌های دورتر صفر فرض می‌شود. بنابراین جمله اول هامیلتونی سهم پرش الکترون از سایت  $i$  ام به  $j$  ام است. جمله دوم، انرژی پتانسیل است و  $U$  به برهم کنش کولنی مربوط است.

### ۱-۳-۱ مدل هابارد در $\langle n \rangle = 1$ و حد $U \gg t$

مدل هابارد در این حد حالت نیمه‌پر<sup>۹</sup> را نشان می‌دهد یعنی در هر سایت یک الکترون وجود دارد و دافعه کولنی مانع آن است که در یک سایت بیش از یک الکترون (دو الکترون) قرار گیرد.

برای این که الکترون به سایت همسایه بپرد باید بر انرژی  $U$  غلبه کند که در حد  $U \gg t$  بسیار بیشتر از انرژی جنبشی الکترون،  $t$ ، است و بنابراین الکترون‌ها به اصطلاح در جای خود می‌زنند. حالت پایه مدل هابارد در این حد یک عایق بس ذره‌ای موسوم به عایق مات<sup>۱۰</sup> است. شکل (۱-۲) پیش‌بینی میدان میانگین از فاز مغناطیسی و الکتریکی مدل هابارد را نشان می‌دهد<sup>۱۱</sup> [۵].

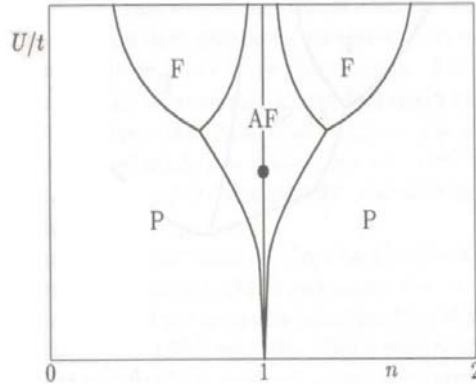
<sup>۷</sup> Hubbard, 1963

<sup>۸</sup> hopping interaction

<sup>۹</sup> half-filled

<sup>۱۰</sup> Mott insulator

<sup>۱۱</sup> این شکل از محاسبات خاصی به دست نیامده و تنها یک طرحواره است، البته با دیاگرام فاز Hartree-Fock برای شبکه مربعی [۶] و مدل هابارد برای شبکه مکعبی سه بعدی [۷] در توافق است. مرجع من از این شکل در بالا ذکر شده است.

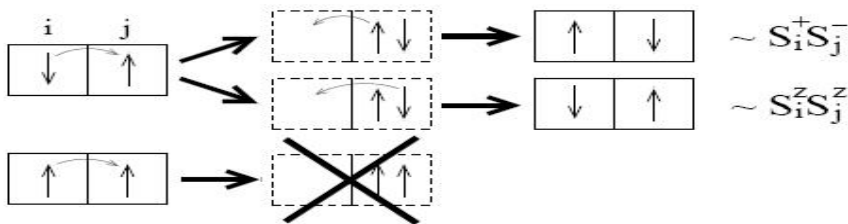


شکل (۱-۲): پیش بینی میدان میانگین از نمودار فاز مدل هابارد برای شبکه‌ی آبرمکعب  $d$  بعدی در دمای صفر.  $P$  پارامغناطیس،  $F$  فرومغناطیس و  $AF$  فاز پادفرومغناطیس را نشان می‌دهد. همه‌ی حالت‌ها در فاز فلزی هستند و نقطه‌ی سیاه گذار مات را نشان می‌دهد. نمودار حول  $n = 1$  متقارن است زیرا در رفتار مغناطیسی یا الکتریکی ماده تفاوتی ندارد که مثلاً در  $10\%$  جایگاه‌ها دو الکترون وجود دارد یا اصلاً الکترون نیست.

الکترون‌ها به گونه‌ای در جایگاه خود قرار می‌گیرند که انرژی کمینه باشد. بنابراین جمله اول باعث می‌شود اسپین الکترون‌های همسایه مخالف یکدیگر قرار بگیرند تا اصل طرد پاولی مانع پرش نشود. بنابراین مدل هابارد در این حد با مدل پادفرومغناطیس هایزنبرگ با  $s = 1/2$  هم‌نهشت است. از اختلال

مرتبه دوم  $J = -4t^2/U$  حاصل می‌شود (پیوست A) [۵].

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ + S_i^z S_j^z), \quad J < 0 \quad (10-1)$$



## ۴-۱ حالت پایه مدل هایزنبرگ

در حالت فرو مغناطیس یا پادفرو مغناطیس سیستم کلاسیک با دانستن جهت یک الکترون جهت گیری تمامی الکترون های شبکه مشخص می شود. اگر  $J > 0$ ، نظم فرومغناطیس در شبکه موجود است و همه ی اسپین ها هم جهت اند و اگر  $J < 0$ ، نظم نیل<sup>۱۲</sup> (پادفرومغناطیس) در شبکه برقرار است. در دمای صفر مطلق هر چند از افت و خیزهای گرمایی خبری نیست اما افت و خیزهای کوانتومی ناشی از اصل عدم قطعیت هایزنبرگ رسیدن به نظم را دشوار می کند. اهمیت این افت و خیزها با کاهش بعد و اندازه اسپین افزایش می یابد. در ادامه به بررسی حالت پایه سیستم کوانتومی در حالت فرو مغناطیس و پادفرو مغناطیس می پردازیم.

### ۱-۴-۱ حالت پایه فرومغناطیس، $J > 0$

هامیلتونی هایزنبرگ، رابطه (۱-۱)، را در نظر داریم، انرژی کل را می توانیم به صورت حاصل جمع انرژی پیوندها بنویسیم یعنی

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} E_{ij} \quad (11-1)$$

$$E_{ij} = -JS_i \cdot S_j = -\frac{J}{4} [(S_i + S_j)^2 - S_i^2 - S_j^2]$$

انرژی زمانی کمینه می شود که  $(S_i + S_j)^2$  بیشینه باشد یعنی  $|S_i + S_j| = 2S$ :

$$(E_{ij})_{min} = J[s(s+1) - s(2s+1)] = -Js^2 = -\frac{J}{4} \quad (12-1)$$

یعنی انرژی زمانی کمینه است که یک مؤلفه از همه ی اسپین ها هم جهت با هم قرار گیرند. بنابراین در حالت پایه سیستم فرومغناطیس (در بالاتر از یک بعد فضایی)، شاهد شکست خود تقارن دورانی هستیم. البته به علت تقارن هامیلتونی نسبت به دوران حالت پایه واحد نیست و مغناطش هر جهتی از فضا را می تواند اختیار کند.

### ۱-۴-۲ حالت پایه پادفرو مغناطیس، $J < 0$

حال سراغ هامیلتونی هایزنبرگ با برهم کنش پادفرو مغناطیس می رویم. فرآیندی را که برای تعیین کمینه انرژی حالت فرو مغناطیس انجام دادیم برای این حالت تکرار می کنیم. انرژی یک پیوند در حالت پادفرو مغناطیس به صورت زیر است:

$$E_{ij} = -JS_i.S_j = \frac{|J|}{4} [(S_i + S_j)^2 - S_i^2 - S_j^2] \quad (13-1)$$

این انرژی زمانی کمینه می شود که  $|S_i + S_j| = 0$ ، یعنی حالت پایه سیستم پادفرو مغناطیس با  $S = 1/2$ ، یگانه یا پادمتقارن اسپینی است.

$$(E_{i,j})_{min} = -|J|s(s+1) = -\frac{3}{4}|J| \quad (14-1)$$

حالت پایه سیستم با برهم کنش فرومغناطیس، فرومغناطیس است اما از برهم کنش پادفرو نمی توان انتظار نظم نیل را داشت، بلکه حالت پایه یگانه است. در حالت فرو مغناطیس حالت پایه واحد است یعنی همه ی اسپین ها هم جهت اند اما اینجا تنها اطلاعی که داریم  $S_{tot} = 0$  و  $\langle S_i^z \rangle = 0$  (برای هر  $i$ ) است که حالت یگانه ای را ایجاد نمی کند. این تفاوت از آنجا ناشی می شود که پارامتر نظم فرومغناطیس یعنی  $S_{tot}^z$  با هامیلتونی جابه جا می شود اما پارامتر نظم پادفرو مغناطیس یعنی  $m^{\uparrow} = \sum_{j \in A} S_j^z - \sum_{i \in B} S_i^z$  با هامیلتونی جابه جا نمی شود. در حالت پایه پادفرو مغناطیس شکست تقارن انتقالی داریم اما تقارن دورانی حفظ می شود و متوسط اسپین در حالت یگانه صفر است. در حالت پایه فرو مغناطیس عکس این اتفاق می افتد یعنی شکست خود به خود تقارن دورانی داریم اما تقارن انتقالی حفظ می شود.

تابع موج نیل و انرژی در ازای یک پیوند، در حد نظم نیل به صورت زیر است:

$$|\psi_N\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots\rangle \quad (15-1)$$

$$E_{i,j} = -\langle \psi_N | JS_i.S_j | \psi_N \rangle = ?$$

$$S_i.S_j = S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + S_i^z S_j^z$$

$$JS_i.S_j |\uparrow_i \downarrow_j\rangle = J/4 |\downarrow_i \uparrow_j\rangle + J/4 |\downarrow_i \uparrow_j\rangle - J/4 |\uparrow_i \downarrow_j\rangle$$