

پایداری گرمایی پلاتوهای مغناطیسی در مدل هایزبرگ پادفرومغناطیس بر روی نوار کاگومه

سلیمی ارشد، سید امیر^۱؛ سیوف جهرمی، سید سعید^۱

^۱دانشکده فیزیک دانشگاه تحصیلات تکمیلی علوم پایه زنجان، بلوار پرفسور یوسف ثبوتی، زنجان

چکیده

در این مقاله به مطالعه پایداری گرمایی سکوهای مغناطش در مدل هایزبرگ پادفرومغناطیس بر روی نوار کاگومه می‌پردازیم. در این راستا با استفاده از الگوریتم *iTEBD* به آشکار سازی دیاگرام فاز سکوهای مغناطش در دمای صفر در حضور میدان مغناطیسی می‌پردازیم. و نشان خواهیم داد که این سکوهای مغناطش پتانسیل میزبانی از فازهای جذابی از جمله فاز بلور پیوندی را دارند. در ادامه با افزایش دما به مطالعه پایداری گرمایی این سکوهای مغناطش می‌پردازیم و نشان خواهیم داد که با افزایش دما و افزایش افت و خیزهای گرمایی، سکوهای مغناطش به تدریج محو شده و در نهایت سیستم به یک فاز پارامغناطیس دمای بالا گذار می‌نماید. به طور خاص با مطالعه انرژی و ظرفیت گرمایی فاز بلور پیوندی حاضر در سکو مغناطش $3/5$ در حضور دما گذار فاز در این سکو را مشخصه یابی می‌نماییم.

واژه های کلیدی: نوار کاگومه، درماندگی مغناطیسی، شبکه های تانسوری، گذار فاز گرمایی

Thermal stability of magnetization plateau in the antiferromagnetic Heisenberg model on the Kagome stripe

Salimi Arshad, Seyed Amir¹; Soyouf Jahromi, Seyed Saeed¹

¹ Department of physics, Institute for Advanced Studies in Basic Sciences, Zanjan

Abstract

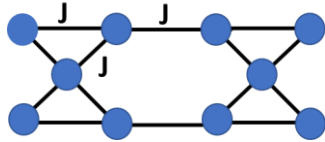
*This article discusses the study of thermal stability of magnetic plateaus in the Heisenberg antiferromagnetic model on the Kagome Stripe. Using the *iTEBD* algorithm, the phase diagram of magnetic plateaus at zero temperature in the presence of a magnetic field is revealed. It is demonstrated that these magnetic plateaus host attractive phases such as the valance-bond-crystal (VBC) phases. Furthermore, the article explores the thermal stability of these magnetic plateaus by showing that they gradually disappear with increasing temperature and thermal fluctuations, ultimately transitioning to a high-temperature paramagnetic phase. Specifically, the energy and specific heat of the VBC phase in the $3/5$ magnetic plateau is studied to determine the phase transition in the presence of temperature.*

Keywords: Kagome Stripe, Frustrated antiferromagnets, Tensor network, Thermal phase transition

مدل هایزبرگ پادفرومغناطیس به دلیل میزبانی از فازهای پارامغناطیس کوانتومی که در شدت‌های میدان مغناطیسی مختلف ظهور می‌کنند از اهمیت ویژه برخوردار است. در دماهای پایین، ترکیب درماندگی هندسی و افت و خیزهای کوانتومی موجب ظهور فازهای تبهگنی از جمله بلور پیوندی با پیکر بندی‌های مختلفی از شدت همبستگی‌های کوانتومی بر روی باندهای شبکه می‌شود اما در دماهای بالا اسپین‌ها به دلیل افت خیزهای گرمایی شدید در به صورت بی‌نظم و در همه جهات جهت‌گیری کرده و سیستم رفتار پارامغناطیس

مقدمه

مدل هایزبرگ پادفرومغناطیس بر روی شبکه کاگومه یکی از چالش برانگیزترین و مهم‌ترین مدل‌ها در فیزیک ماده چگال است [۱]. این مدل برهمکنش بین اسپین‌ها را بر روی شبکه‌ای با ساختارهای مثلثی به هم پیوسته را توصیف می‌کند. یک برش شبه یک بعدی از شبکه کاگومه را نوار کاگومه می‌نامند. با توجه به ساختار مثلثی شبکه، سیستم اسپینی تعریف شده بر روی آن دارای درماندگی هندسی است. مطالعه



شکل ۱: نوار کاگومه که به صورت برش شبه یک بعدی از شبکه کاگومه دو بعدی حاصل می شود. دایره های جایگاه های شبکه که بر روی آنها اسپین های ۱/۲ قرار دارد را توصیف می نماید.

به دلیل ساختار مثلثی نوار کاگومه که دارای درماندگی هندسی می باشد، در آن آرایش اسپین ها به صورت پاد موازی در راس های مثلث امکان پذیر نبوده و حالت پایه با کمینه انرژی برهمکنش بین اسپین ها برابر نخواهد بود. علاوه بر این مدل هایزنبُرج پادفرومغناطیس به صورت تحلیلی حل پذیر نبوده و دارای جواب دقیق نمی باشد به همین علت از روش های عددی برای حل این مدل استفاده می کنیم.

شبکه های تانسوری

شبکه های تانسوری اصولاً یک چارچوب ریاضی برای نمایش تانسورهای با ابعاد بالا هستند که می توانیم برای نمایش بهینه ی تابع موج از شبکه تانسوری استفاده کنیم. نمایش عمومی تابع موج حالت پایه یک سیستم را می توان به صورت زیر نوشت:

$$|\psi\rangle = \sum_{i_1 i_2 \dots i_N} C_{i_1 i_2 \dots i_N} |i_1\rangle \otimes |i_2\rangle \otimes \dots \otimes |i_N\rangle \quad (1.1)$$

که در آن $|i_r\rangle$ همان ویژه حالت تابع موج به ازای $r = 1, \dots, N$ و $C_{i_1 i_2 \dots i_N}$ همان ظرایب بسط تابع موج هستند. همچنین علامت \otimes نشان دهنده ضرب تانسوری برای هر کدام از حالات کوانتومی مربوط به تابع موج است. یکی از روش های یافتن حالت پایه تابع موج بر اساس شبکه های تانسوری استفاده از الگوریتم تحول در زمان موهومی (infinite time evolving block decimation) (iTEBD) است، در این مقاله ابتدا یک حالت کوانتومی تصادفی را در نظر گرفته و با تحول این حالت در زمان موهومی تحت اثر هامیلتونی (۱) و با استفاده از الگوریتم iTEBD حالت پایه مدل هایزنبُرج پادفرومغناطیس را در حد شدت های میدان مغناطیسی بدست می آوریم و با افزایش دما به بررسی پایداری سکوهای مغناطش می پردازیم. به منظور محاسبه حالت های تعادلی در دماهای غیر صفر، می توان الگوریتم iTEBD را تعمیم داد و با استفاده از تکنیک های خالص سازی (purification) و استخراج حالت های خالص گرمایی از یک فضای هیلبرت تعمیم یافته، حالت های تعادلی گرمایی سیستم را استخراج نمود.

دارد. بدیهی است که با تغییر دما شاهد یک گذار فاز گرمایی بین حالت های بلور پیوندی دمایی پایین و فاز پارامغناطیس در دماهای بالا باشیم. مدل هایزنبُرج پادفرومغناطیس بر روی شبکه کاگومه به طور گسترده ای هم از نظر تجربی و هم از نظر تئوری مورد مطالعه قرار گرفته است و خواص آن طیف وسیعی از سیستم های فیزیکی از جمله ابررساناهای دما بالا، درماندگی مغناطیسی و مایع اسپینی کوانتومی را شامل می شود. در همین راستا، در این مقاله به مطالعه پایداری گرمایی سکوهای مغناطش در مدل هایزنبُرج پادفرومغناطیس بر روی نوار شبه یک بعدی کاگومه (شکل ۱) در حضور دما می پردازیم و علاوه بر آشکار سازی دیاگرام فاز سکوهای مغناطش، پایداری این سکوهای مغناطش در حضور دما را مورد مطالعه قرار می دهیم [۲]. به منظور یافتن حالت پایه سیستم در دمای صفر و حالت های تعادلی گرمایی در دماهای غیر صفر و آشکار کردن سکوهای مغناطش و بررسی پایداری این سکوها در حضور دما از روش شبکه های تانسوری مبتنی بر تحول در زمان موهومی (infinite time evolving block decimation) (iTEBD) استفاده نموده [۳] و نمایش تانسوری حالت پایه (حالت تعادلی گرمایی) سیستم را بر روی یک نوار کاگومه با طول بینهایت در حد ترمودینامیک محاسبه می نماییم. همچنین با آنالیز انرژی و مشتق آن (ظرفیت گرمایی) در حضور دما به بررسی گذار فاز کوانتومی و نقطه گذار این سکوها می پردازیم.

مدل

هامیلتونی مدل هایزنبُرج پادفرومغناطیس اسپین ۱/۲ در حضور میدان مغناطیسی بر روی نوار کاگومه (شکل ۱)، به صورت زیر تعریف می شود:

$$H = \sum_{\langle i,j \rangle} J_{i,j} S_i \cdot S_j - h \sum_i S_i^z \quad (1)$$

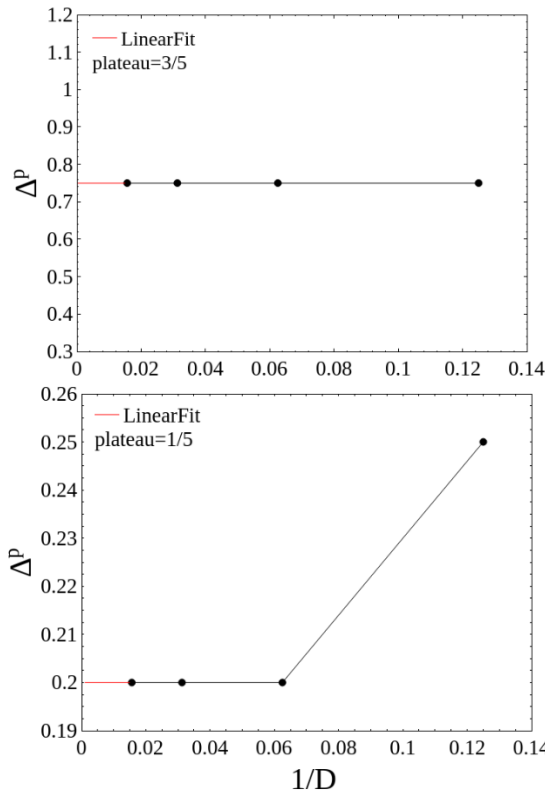
که در آن S_i عملگر اسپین ۱/۲ است، S^z مولفه Z میدان مغناطیس، $J_{i,j}$ شدت برهمکنش های تبدلی و h شدت میدان مغناطیسی در راستای Z می باشد. بعلاوه $\langle i,j \rangle$ در جمله جمع اول بیانگر جمع بر روی همسایه های نزدیک است. در دمای صفر، هنگامی که شدت میدان مغناطیسی زیاد شود، سیستم در فاز قطبیده قرار گرفته و تمام اسپین ها به صورت منظم با میدان مغناطیسی هم راستا می شوند. زمانی که برهمکنش پادفرومغناطیس هایزنبُرج قوی باشد حالت پایه سیستم نامعلوم است.

دیاگرام فاز

شکل ۲ نشان دهنده مغناطش میانگین سیستم در راستای Z به ازای باندهای مجازی ۸، ۱۶، ۳۲، ۶۴ است و از رابطه زیر محاسبه می شود:

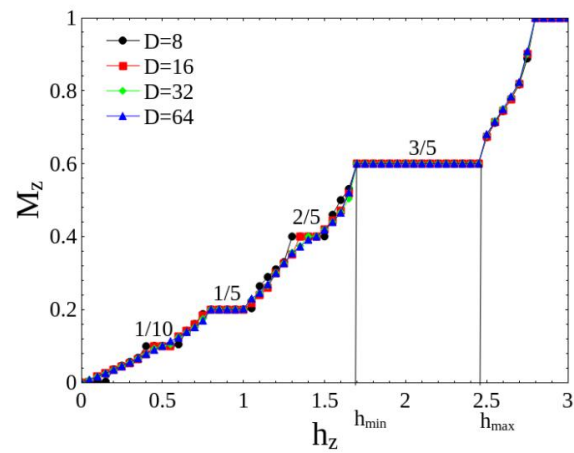
$$M_z = \sum_i \frac{M_z^i}{N} \quad (2)$$

که در آن N تعداد سایت های موجود در سلول واحد دوره ای شبکه است که محاسبات شبکه های تانسوری بر روی آن انجام شده است.



شکل ۳: نمودار مقیاس بندی پهنای سکوی مغناطش ۱/۵ و ۳/۵ بر حسب معکوس باند مجازی

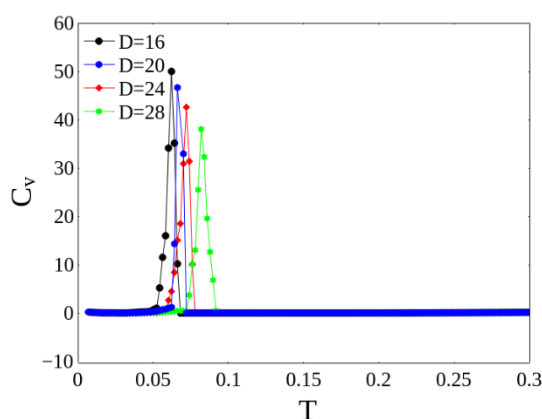
ماهیت این سکوی مغناطش توسط تعداد زیادی حالت کوانتومی تبهگن، با انرژی برابر تعیین می شود. اعداد کسری که در سکوی مغناطش مشاهده می شوند مرتبط است با مقدار کسری از اسپین های کل سیستم که توسط میدان مغناطیسی با یکدیگر هم جهت و موازی شده اند و صورت کسر هر کدام از این سکوی مغناطش با میزان شدت میدان مغناطیسی مرتبط است و مخرج کسری این سکوها نیز با برهمکنش بین اسپین ها و تقارن شبکه ارتباط دارد. لازم به ذکر است در محاسبات ما سایر مولفه های مغناطش در راستای X و Y صفر است و سکوی مغناطش در راستای Z قابل مشاهده است. در ادامه به مطالعه صفحه ی مغناطیسی ۳/۵ در $hz = 2.0$ که پایداری بیشتری نسبت به سایر سکوها دارد (در ناحیه ی بیشتری از شدت میدان حضور دارد) می پردازیم و حالت پایه سیستم را در دمای صفر بر روی این صفحه اشکار می کنیم. با بررسی مغناطش موضعی $\langle S_z \rangle$ و همبستگی اسپین-اسپین $\langle S_i \cdot S_{i+1} \rangle$ بین همسایه های نزدیک، پیکر بندی یک فاز بلور پیوندی بر روی صفحه مغناطیسی ۳/۵ (شکل ۳) قابل مشاهده است. در شکل ۳ مغناطش



شکل ۲: مغناطش میانگین در راستای Z. سکوها مغناطیسی مختلف در شدت میدان مغناطیسی و مقدار مغناطش کسری اشباع آنها قابل تشخیص است.

محاسبات iTEBD برای آشکار سازی این سکوی مغناطش بر روی سلول واحد دوره ای با ۲۰ جایگاه انجام شده است. سکوی مغناطش متعدد با مغناطش اشباع کسری ثابت در دمای صفر به خوبی در نمودار قابل رویت است. این سکوی مغناطش دارای مقادیر ۱/۱۰، ۱/۵، ۲/۵، ۳/۵ هستند و همانطور که در نمودار قابل مشاهده است به ازای باند مجازی $D=32, 64$ صفحه مغناطیسی ۱/۵، ۳/۵ از پایداری بیشتری نسبت به سایر سکوها برخوردار است و سایر سکوها در حد ترمودینامیک به مرور محو می شود. در اینجا منظور از حد ترمودینامیک همان بعد مجازی سیستم است که با افزایش بعد مجازی، پهنای سکوی مغناطش محو می شود. با مقیاس بندی برای پهنای سکوی مغناطش ۱/۵ و ۳/۵ بر حسب معکوس باند مجازی (شکل ۳) نشان داده شده است که این سکوها پایدار هستند.

نوسانات گرمایی بر اثرات میدان مغناطیسی غلبه کرده و پلاتو ها نیز با افزایش دما ناپایدار شده و از پهنای آنها کاسته می شود تا جایی که در نقطه گذار فاز گرمایی به کلی ناپدید می گردد. نقطه گذار فاز، T_c ، را می توان به خوبی در هریک از نمودار های انرژی یا ظرفیت گرمایی در محدوده $0.05 < T < 0.1$ به ازای مقادیر باند مجازی $D=16, 20, 24, 28$ مشاهده نمود.



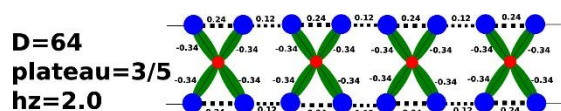
شکل ۶: نمودار ظرفیت گرمایی بر حسب دما برای باندهای مجازی مختلف.

به منظور تعیین دقیق دمای بحرانی پهنای صفحه مغناطیسی، Δ^p را که به صورت زیر تعریف می شود، می توان به عنوان پارامتر نظم در نظر گرفت:

$$\Delta^p = h_{max}^p - h_{min}^p, \quad p = 3/5$$

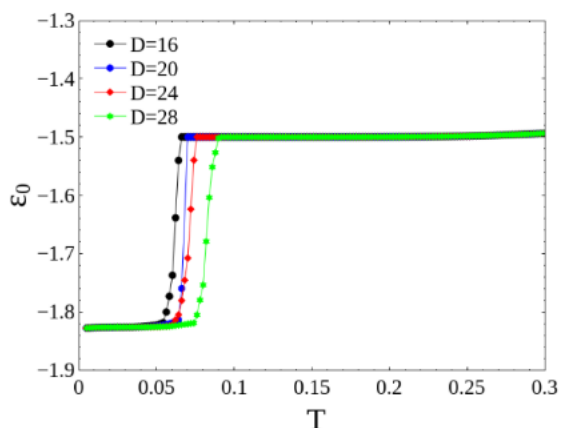
که در آن h_{max} و h_{min} به ترتیب مقدار بیشینه و کمینه شدت میدان مغناطیسی را در ابتدا و انتهای صفحه مغناطیسی p می باشد. در زیر دمای بحرانی و در فاز بلور پیوندی، پهنای صفحه مغناطیسی غیر صفر است و در بالای دمای بحرانی که صفحه به کلی از بین رفته و سیستم به فاز پارامغناطیس گذار نموده است، $\Delta = 0$ خواهد بود. دمایی که در آن Δ ناپدید می شود دمای بحرانی سیستم خواهد بود. شکل ۷ پارامتر نظم Δ را به ازای مقادیر مختلف دما برای $D=16$ نمایش می دهد. همانطور که در شکل مشاهده می

موضعی مثبت و منفی به ترتیب با دایره های آبی و قرمز رنگ نشان داده شده است که میزان بزرگی این دایره ها مرتبط است با مقدار مغناطش موضعی هر کدام از جایگاه ها است. همچنین خطوط چین در شکل نشان دهنده همبستگی های مثبت و خطوط پیوسته نشان دهنده همبستگی های منفی است که با توجه به مقدار همبستگی اسپین-اسپین همسایه های نزدیک با ضخامت و رنگ سبز نشان داده شده است. سایر حالت های تبهگن را از چرخش چیدمان همبستگی اسپین ها می توان بدست آورد. بعلاوه در طرح ایجاد شده حاصل از همبستگی اسپین ها شاهد شکست تقارن C_6 شش ضلعی ها و تقارن C_3 بر روی مثلث های نوار کاکومه هستیم.



شکل ۷: یکی از پیکربندی های تبهگن فاز بلور پیوندی بر روی نوار کاکومه در صفحه مغناطیسی $3/5$ و در $hz = 2.0$

در ادامه به مطالعه رفتار سیستم در دمای غیر صفر می پردازیم. شکل ۵ و ۶ به ترتیب نمودار انرژی و ظرفیت گرمایی (مشتق مرتبه اول انرژی نسبت به دما) در صفحه مغناطیسی $3/5$ نمودار نشان می دهند.



شکل ۸: نمودار انرژی سیستم در حضور دما برای باندهای مجازی مختلف.

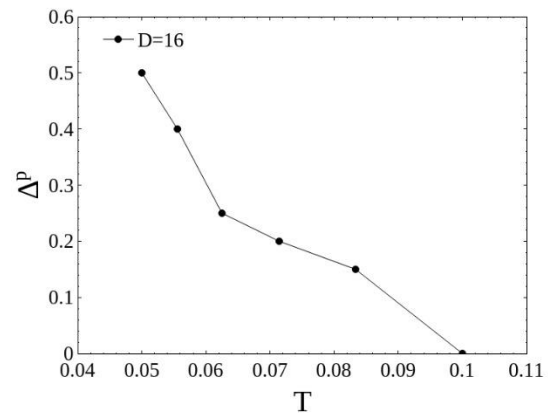
در نمودار انرژی مشاهده می کنیم که با افزایش تدریجی دما و افت و خیزهای گرمایی در سیستم، همبستگی های کوانتومی اسپین ها به تدریج از بین رفته و در نهایت سیستم به یک فاز پارامغناطیس گرمایی در دماهای بالا گذار می کند. بعلاوه

antiferromagnetic Heisenberg model on a kagome-strip chain
PhysRevB.97.014412 (2018)

[2] C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila, *Introduction to Frustrated Magnetism Materials, Experiments, Theory* (Springer, Berlin, 2013)

[3] G. Vidal Classical Simulation of Infinite-Size Quantum Lattice Systems in One Spatial Dimension *PRL* **98**, 070201 (2007)

شود، دمای بحرانی با دقت بسیار خوبی در $T_c=0.1$ آشکار می گردد.



شکل ۷: نمودار پارامتر نظم Δ بر حسب دماهای مختلف.

نتیجه گیری

در این مقاله به مطالعه و بررسی پایداری گرمایی سکوهای مغناطش در مدل هایزبرگ پادفرمغناطیس بر روی نوار کاگومه پرداختیم. با استفاده از الگوریتم Itebd حالت پایه سیستم را در حد ترمودینامیک، محاسبه نموده و سکوهای مغناطش مربوطه را آشکار سازی کردیم. همچنین با افزایش دما به مطالعه پایداری صفحه‌ی مغناطیسی $3/5$ که نسبت به سایر سکوها در ناحیه بیشتری از شدت میدان قرار دارد پرداختیم و با محاسبه‌ی انرژی و مشتق آن به بررسی گذار فاز گرمایی آن پرداختیم. نتایج ما نشان می‌دهد که در حضور میدان مغناطیسی و در دمای صفر سکوهای مغناطش دارای مغناطش اشباع کسری ثابت هستند و سه عامل در به وجود آمدن این سکوهای مغناطش در سیستم تاثیر دارند: ۱- تعداد اسپین‌ها در سیستم، ۲- تقارن زیر شبکه‌ی سیستم، ۳- شدت میدان مغناطیسی. در مورد عامل ۱ باید توجه داشت که در حضور میدان مغناطیسی بر روی هر سکو مغناطش کسری از اسپین‌ها با میدان هم راستا شده و در نتیجه بسته به اینکه چه تعداد اسپین در سلول واحد سیستم وجود داشته باشد سکوهایی با ضرایب کسری مختلف را می‌توان مشاهده کرد. همچنین با مطالعه‌ی پایداری صفحه‌ی مغناطیسی در حضور دما شاهد افزایش افت و خیزهای گرمایی در سیستم بودیم که باعث محو شدن تدریجی صفحه مغناطیسی می‌شود. بعلاوه مطالعه‌ی مغناطش موضعی و همبستگی اسپینی بر روی این صفحه‌ی مغناطیسی نشان می‌دهد که حالت پایه آن از نوع بلور پیوندی بوده و تقارن های چرخشی C_3 و C_6 در آن شکسته است و همچنین بلور پیوندی دارای حالت‌های تبهگنی می‌باشد که با چرخش چیدمان همبستگی اسپینی این حالت‌های تبهگنی قابل مشاهده هستند.

مرجع ها

[1] Katsuhiko Morita, Takanori Sugimoto, Shigetoshi Sota, and Takami Tohyama Magnetization plateaus in the spin- 1/ 2