

## بررسی گذار فازهای شبکه دویعدی کگومی در مدل XY ناهمسانگرد و با استفاده از روش میدان میانگین

صبا مرتضی پور و فرهاد شهبازی

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان، اصفهان

(دریافت مقاله: ۸۵/۷/۱۹؛ دریافت نسخه نهایی: ۸۶/۳/۲)

### چکیده

بررسی سیستمهای ناکام مغناطیسی<sup>۱</sup> به وسیله روش میدان میانگین<sup>۲</sup> می‌تواند اطلاعات کیفی مناسبی در مورد رفتار سیستم در اختیار ما قرار دهد. این اطلاعات برای سیستمهای به شدت ناکام مانند شبکه‌های کگومی که در بعضی از مواد با این ساختار گذار فاز به صورت تجربی مشاهده نشده یا به دلایل تکنیکی مشاهده آن تا کنون ناممکن بوده بسیار ارزشمند است. استفاده از روش میدان میانگین می‌تواند روش سریعی برای مطالعه مقدماتی مدل‌های پیشنهادی برای این دسته بلورها باشد. در این مقاله سعی شده است تا با اضافه کردن یک نوع ناهمسانگردی به مدل XY دویعدی، رفتار سیستم به وسیله روش میدان میانگین مورد بررسی قرار گیرد و در نهایت احتمال وجود نقطه سه‌بحرانی<sup>۳</sup> در سیستم بررسی شود.

واژه‌های کلیدی: میدان میانگین، کگومی، مدل XY، ناهمسانگردی، نقطه سه بحرانی، گذار فاز، ناکامی مغناطیسی

### ۱. مقدمه

تغییر تقارن کلی سیستم این اثر در آنها از بین نمی‌رود. این نکته نیز قابل اثبات است که اگر تبهگنی در حالت پایه تا دمای صفر کلونین ادامه پیدا کند اصل سوم ترمودینامیک نقض خواهد شد. بر همین اساس می‌توان به دنبال فیزیک عمیق تری در مجموعه مواد ناکام بود. تحقیقات در این حوزه سبب ایجاد شاخه‌هایی چون یخهای اسپینی<sup>۵</sup> [۱ و ۲]، اسپین نماتیکها [۳] و اسپین کریستالهای مایع [۴ تا ۷] شد.

مدل کلاسیک XY با برهمکنش آنتی فرومغناطیس در شبکه کگومی دویعدی بنا شده براساس واحدهای مثلثی گوشه مشترک<sup>۶</sup>، و مدل کلاسیک هایزنبرگ<sup>۷</sup> با برهمکنش آنتی فرومغناطیس در شبکه سه بعدی پائروکلر<sup>۸</sup> بنا شده بر اساس واحدهای مربعی گوشه مشترک، دو نمونه از شبکه‌ها در

در سالهای اخیر تحقیقات زیادی بر روی مواد مغناطیسی که از نظر هندسی دچار ناکامی مغناطیسی<sup>۴</sup> هستند به عمل آمده است. ناکامی هندسی مغناطیسی عمدتاً به واسطه تبهگنی بالا در تراز پایه کلاسیکی سیستم، در سیستمهای اسپینی شبکه‌های مثلثی اتفاق می‌افتد. دلیل این امر آن است که اسپینهای موجود در سیستم نتوانسته‌اند با یکدیگر همبستگی پیدا کنند و یک نظم بلند برد در سیستم ایجاد نمایند. به عنوان مثالی برای این حالت می‌توان از مدل آیزینگ آنتی فرومغناطیس برای شبکه مثلثی دویعدی نام برد. مواد به شدت ناکام مغناطیسی هم‌دسته‌ای از مواد ناکام مغناطیسی هستند که دارای تعداد نامحدودی تراز پایه کلاسیک هستند به گونه‌ای که حتی با

۵. Spin ice

۶. Corner-sharing triangular units

۷. Heisenberg

۸. Pyrochlore

۱. Magneto frustrated

۲. Mean field

۳. Tree critical point

۴. Geometrical magneto frustration

که این جمله ناشی از برهمکنش بین نزدیکترین همسایه‌ها است. هامیلتونی فوق را می‌توان به صورت زیر بازنویسی کرد:

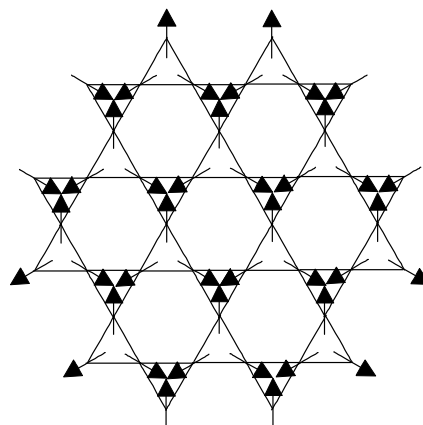
$$H = -\frac{J}{P} \sum_P (\bar{S}_1^P + \bar{S}_2^P + \bar{S}_3^P)^2 + \frac{3J}{P} \bar{S}_1^2, \quad (2)$$

که  $P$  نشانگر تعداد واحدهای مثلثی می‌باشد. بنابراین کمینه انرژی مدل فوق وقتی حاصل می‌شود که مجموع اسپینها، که با بردارهای یکه در صفحه مشخص می‌شوند با هم زاویه  $120^\circ$  بسازند. حال فرض کنید جهت یک اسپین به دلخواه تعیین شود. برای جهت‌گیری در اسپینهای دیگر، هرکدام باید زاویه  $120^\circ$  با اسپین اولی و با خودشان بسازند حال چنانچه دو اسپین جایشان را با هم عوض کنند، باز مجموع بردارها صفر است. بنابراین دو حالت مجزا برای تعیین حالت پایه یکه مثلث وجود دارد به شرط این که اسپین اولی تعیین جهت شده باشد. چنانچه اسپین اولی به دلخواه در صفحه بچرخد دو اسپین باقی‌مانده نیز باید با همان زاویه بچرخند تا مجموع صفر بماند. بنابراین تقارن مدل فوق  $U(1) \times Z_3$  است که  $U(1)$  مربوط به تقارن دورانی سرتاسری در صفحه می‌باشد و تقارن  $Z_3$  مربوط به جایگشت دو اسپین باقی‌مانده ناشی از تقارن سراسری  $U(1)$  است. تبهگنی باقی‌مانده ناشی از تقارن  $Z_3$  در حالت پایه برابر است با  $\Omega = 3^P$  که  $P$  تعداد مثلثها می‌باشد و رابطه آن با تعداد اسپینها عبارت است از  $N = \frac{3P}{2}$ ، چرا که هر اسپین بین دو مثلث مشترک است. بنابراین آنتروپی حالت پایه برابر است با:

$$S = k_B \ln \Omega = k_B \ln 3^{\frac{2N}{3}} = \frac{2N}{3} k_B \ln 3, \quad (3)$$

که نشان دهنده بی‌نهایت بودن تبهگنی حالت پایه در حد ترمودینامیکی است که این مشخصه سیستمهای مغناطیسی شدیداً ناکام است.

سعی ما در این پژوهش بر آن است تا با تحلیل رفتار نوعی از شبکه‌های ناکام، به نام شبکه کگومی تحت هامیلتونی  $XY$ ، به علاوه جمله خاصی که بر اساس ناهمسانگردی در جهت‌های آسان بنا شده، احتمال وجود گذار فاز مرتبه اول و رفتارهای بحرانی را در این بلور خاص مورد بررسی قرار



شکل ۱. مدل  $q=0$ .

دسته‌بندی شبکه‌های به شدت ناکام مغناطیسی هستند. به واسطه تشابه این خواص ما تمرکز خود را بر روی شبکه کگومی معطوف کردیم.

همان گونه که اشاره شد شبکه دو بعدی کگومی [۸ و ۹] (شکل ۱) یک نوع از شبکه‌هایی است که تحت عنوان شبکه‌های گوشه مشترک دچار ناکامی شدید مغناطیسی هستند. این شبکه دارای ساختاری دو بعدی است که اهمیت آزمایشگاهی زیادی در موادی چون اسپینلها<sup>۱</sup> ( $Li_{1+x}Mn_xO_4$ ) [۱۰ و ۱۱]، SCGOها [۱۲]، ولبراتیته<sup>۲</sup> [۷]، جاروسیتها<sup>۳</sup> [۱۳ تا ۱۶] و پایروکلرها<sup>۴</sup> (مانند  $Sm_2M_2O_7$  و  $Nd_2M_2O_7$ ) که در آن  $M$  عنصر مولیبدیم [۱۷] و منگنز [۱۸] هستند) دارا است. اهمیت مسئله تا آنجا است که تا کنون دمای گذاری برای موادی چون  $Y_2Mn_2O_7$  و  $Tb_2MO_7O_7$  [۱۹، ۲۰ و ۲۱] مشاهده نشده است، این خود به معنی تبهگنی بالای سیستم در دمای صفر کلویین و نقض قانون سوم ترمودینامیک است.

برای بررسی ناکامی شبکه کگومی ابتدا هامیلتونی مدل

$XY$  را به صورت زیر در نظر می‌گیریم:

$$H = -J \sum_{nn} \bar{S}_i \cdot \bar{S}_j, \quad J < 0 \quad (1)$$

۱. Spinels

۲. Volbrathite

۳. Jarosite

۴. Pyrochlor

دهیم. برای بررسی رفتار این سیستم نیز مدل هامیلتونی مذکور را با استفاده از روش میدان میانگین، مورد بررسی قرار دادیم. گرچه تاکنون تمام مدلها وجود گذار فاز را در این نوع شبکه محتمل دانسته‌اند لیکن آنچه سبب ترغیب ما به حل این مسئله شده آن است که هیچ مدلی تاکنون نتوانسته وجود نقطه سه‌بحرانی را در این شبکه گزارش کند. به عبارت دیگر مدل‌های عادی بدون در نظر گرفتن این نوع ناهمسانگردی، همگی گذار مرتبه دوم و بالاتر را برای این شبکه محتمل دانسته‌اند. دلیل انتخاب این شبکه برای بررسی نیز اهمیت و نقش آن در انواع بلورهای ناکام است که در ادامه به آنها خواهیم پرداخت.

## ۲. نظریه میدان میانگین

برای بررسی خصوصیات گذار فاز مواد، چندین نظریه ارائه شده است که هر کدام دارای کاستیها و مشکلاتی در محاسبه پارامترهای گذار فاز هستند. متداول‌ترین این روشها، روش میدان میانگین،  $RG$ ،  $RG$ ، میدان میانگین<sup>۱</sup>،  $EFRG$ <sup>۲</sup> و ... است [۲۲] که اطلاعات خوبی درباره گذار فاز به ما می‌دهند. مشکل عمده در تحلیل این گونه سیستمها بر سر محاسبه پارامترهای آماری مانند تابع توزیع، انرژی داخلی، تابع پاسخ میدان و سایر کمیت‌های آماری مورد نیاز برای توصیف سیستم است زیرا محاسبه برهمکنش تمام اسپینها با یکدیگر و به دست آوردن مجموع آنها جهت محاسبه مقدار انرژی سیستم از نظر تحلیلی کاری ناممکن می‌نماید. لذا روشهای مختلف با در نظر گرفتن تقریبات متفاوت سعی در محاسبه دقیق‌تر کمیت‌های مورد نیاز دارند.

روشی که برای حل این مسئله از آن یاری جستیم روش میدان میانگین است. همان گونه که ذکر شد مشکل اصلی در حل چنین مسائلی محاسبه برهمکنش میان اسپینها و همسایه‌های اول آنها است که به واسطه نداشتن جهت هر اسپین در طول زمان و البته تعداد زیاد اسپینها، نمی‌توانیم

کمیت‌های مورد نیاز را محاسبه کنیم. اما در روش میدان میانگین با صرف نظر کردن از افت و خیز میدان اعمالی بر اسپینها، میدان مؤثر بر تک تک اسپینها را برابر با میانگین میدان سایر اسپینها و مساوی در نظر می‌گیریم. به عبارت ساده‌تر به جای استفاده مستقیم از اسپین از متوسط هنگردی<sup>۴</sup> آن به علاوه جمله افت و خیز آن استفاده می‌نماییم و در نهایت تا تقریب مورد نظر کمیت‌های مورد نیاز را به دست می‌آوریم. این تقریب ساده کمک زیادی به کاهش پیچیدگی مسئله و حل آن می‌کند. آنچه واضح است آن است که این تقریب در نقاط دور از گذار اعتبار زیادی دارد اما با نزدیک شدن به نقطه گذار و با زیاد شدن و مؤثرتر شدن افت و خیزها، اعتبار این تقریب کاهش می‌یابد. اما با این وجود برای رسیدن به دید کیفی در مورد رفتار سیستم بسیار مؤثر است [۲۱ و ۲۲]. مزیت این روش سادگی و عدم وابستگی به اندازه شبکه است که تأثیر زیادی در کاهش محاسبات دارد.

## ۳. مدل هامیلتونی

برای بررسی شبکه کگومی با روش میدان میانگین یک مدل XY با هامیلتونی زیر در نظر می‌گیریم:

$$H = -J \sum_{mn} \bar{S}_i \bar{S}_j - D \sum_{a=1}^N (\bar{S}_a^a \cdot Z^a)^2. \quad (4)$$

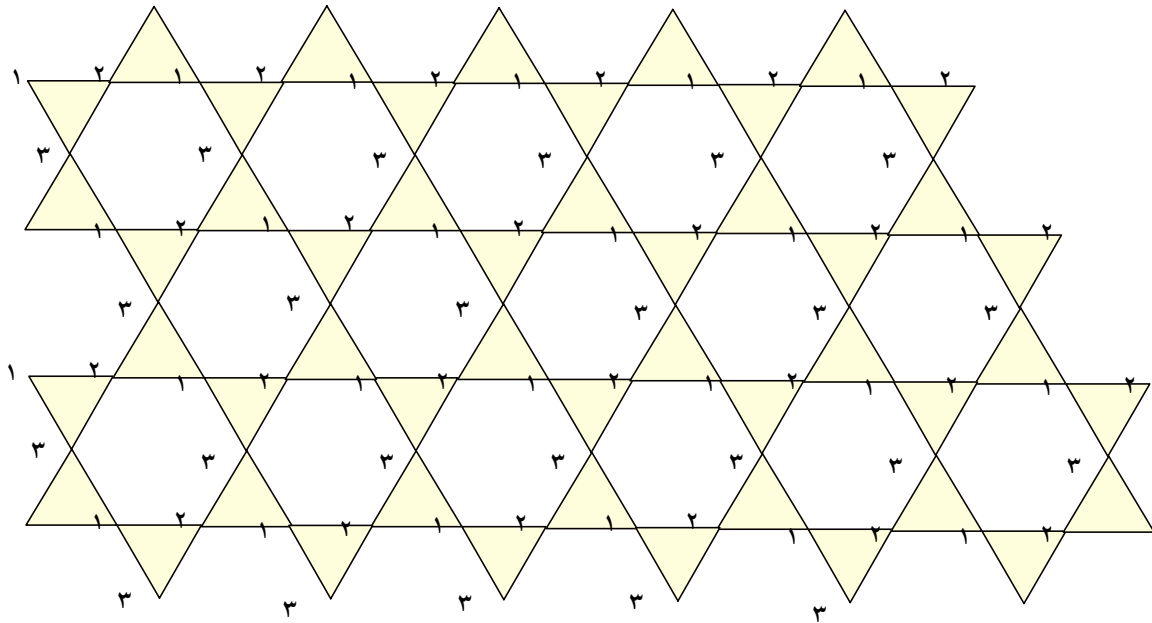
در رابطه بالا جمله اول همان جمله مدل XY با  $J < 0$  (برهمکنش آنتی فرومغناطیسی) [۹، ۲۳، ۲۴ و ۲۵] و جمله دوم  $D > 0$  جمله ناهمسانگردی است. این جمله قرار گرفتن اسپینها در یک جهت را تسهیل می‌کند.  $a$  و  $a$  نیز به ترتیب شماره اسپین و شماره زیر شبکه و  $Z^a$  نیز راستای ناهمسانگردی زیر شبکه است. دلیل ما برای اضافه نمودن این جمله به هامیلتونی H، فیزیکی نبودن تبهگنی بسیار زیاد شبکه کگومی در حالت پایه و نوع تقارن شبکه بلوری است. به عبارت دیگر ما قانون سوم ترمودینامیک را از قبل به عنوان یک اصل پذیرفته‌ایم و با توجه به شبکه بلوری، نوعی از چینش اسپینها را به عنوان متقارن‌ترین حالت ممکن در نظر گرفتیم (شکل ۱) و از آنجا که طبیعت در دماهای پایین به سمت تقارن بیشتر

۱. Renormalization Group

۲. Mean Field Renormalization Group

۳. Effective Field Renormalization Group

۴. Ensemble



شکل ۲. نمای شبکه کگومی تقسیم شده به سه شبکه براوه.

بین سه شبکه تبدیل می شود اکنون تابع پارش سیستم با استفاده از هامیلتونی معرفی شده و با استفاده از میانگین گیری روی تمام اسپینها به صورت زیر محاسبه می کنیم:

$$Z = \int e^{-\beta H} \prod_{i,a} d\bar{s}_i^a = \int e^{\left( \sum_{i < j, a, b} J_{ij}^{ab} \bar{s}_i^a \cdot \bar{s}_j^b + D \sum_{i,a} (\bar{s}_i \cdot Z^a) \right)} \prod_{a,i} d\bar{s} \quad (5)$$

که در آن (a, b = ۱, ۲, ۳) به زیر شبکه و (i, j = ۱ ... n) به شماره اتم یا بلوک باز می گردد. برای محاسبه این انتگرال از تقریب میدان میانگین استفاده می کنیم. یعنی به جای استفاده از  $\bar{S}$  از مقدار متوسط آن به علاوه جمله افت و خیز استفاده نموده و در نهایت تا دقت مورد نظر از جملات افت و خیز صرف نظر می کنیم.

$$\bar{s}_i^a \cdot \bar{s}_j^b = (\bar{M}_i^a + (\bar{s}_i^a - \bar{M}_i^a)) \cdot (\bar{M}_j^b + (\bar{s}_j^b - \bar{M}_j^b)) = -\bar{M}_i^a \cdot \bar{M}_j^b + \bar{M}_i^a \cdot \bar{s}_j^b + \bar{M}_j^b \cdot \bar{s}_i^a + O(\delta S^2) \quad (6)$$

برای جمله موسوم به ناهمسانگردی نیز این ساده سازی را انجام می دهیم:

حرکت می کند انتظار داریم این حالت را به عنوان حالت پایه برگزیند. در این مدل سه جهت که با دورانهایی  $\left[ \frac{2\pi}{3} \right]$  یکدیگر قابل تعریفند به عنوان جهتهای ناهمسانگردی در نظر گرفته می شوند (شکل ۱). همان گونه که قبلاً اشاره شد شبکه غیر براوه کگومی را می توان ترکیبی از سه شبکه براوه با سه جهت ناهمسانگردی مجزا در نظر گرفت (شکل ۲). در شکل ۱ مدل آرایش اسپینی که در آن همه اسپینها به سمت داخل یا خارج مثلث جهت گیری می کنند، نشان داده شده است. این تقارن به تقارن  $q = 0$  معروف است [۱۰].

#### ۴. فرمالیزم میدان میانگین

همان طور که اشاره شد برای شبکه مورد بحث از هامیلتونی رابطه شماره (۴) استفاده می کنیم. قدم اول برای تحلیل آماری سیستم به دست آوردن تابع توزیع و انرژی آزاد سیستم است. برای این منظور ابتدا به سراغ محاسبه تابع توزیع سیستم می رویم. در ابتدا برای سهولت در محاسبات شبکه کگومی را مانند شکل ۲ بلوک بندی می کنیم مزیت این کار تقسیم شبکه غیر براوه کگومی به سه شبکه براوه است که در آن برهمکنش بین اسپینهای همسایه اول به برهمکنش

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = \sum_{i,a} \text{Ln}(I_0(\frac{B_i^a}{T})) + \frac{1}{T^\nu} \sum_{i,a} \frac{B_i^a I_1(-\frac{B_i^a}{T})}{\nu I_0(-\frac{B_i^a}{T})}, \quad (12)$$

$$M_i^a = -\nabla_B F = -\frac{\partial F}{\partial B_i^a} \hat{B}_i^a = \left[ \frac{B_i^a}{\nu T} - \frac{B_i^{a^2}}{16T^3} + \frac{B_i^{a^5}}{96T^5} + O(B^\nu) \right] \hat{B}_i^a. \quad (13)$$

با معکوس کردن رابطه  $M_i^a$  بر حسب  $B_i^a$  می توان رابطه  $B_i^a$  بر حسب  $M_i^a$  را به دست آورد. این رابطه تا تقریب مرتبه ششم  $M_i^a$  به شکل زیر است:

$$B_i^a = \nu T M_i^a + T M_i^{a^2} + \frac{5}{9} T M_i^{a^4} + O(M^\nu). \quad (14)$$

با استفاده از این عبارت آنتروپی را به عنوان تابعی از پاسخ میدان به شکل زیر به دست می آوریم:

$$S = -\sum_{i,a} M_i^{a^2} - \frac{1}{4} \sum_{i,a} M_i^{a^4} + \frac{5}{16} \sum_{i,a} M_i^{a^6} + O(M^\nu). \quad (15)$$

اکنون انرژی آزاد میدان میانگین سیستم را با بر حسب پاسخ میدان به شکل زیر باز نویسی می کنیم:

$$F = \langle H \rangle - TS = -\nu N T \text{Ln}(\nu\pi) - \frac{J}{\nu} \sum_{i,a} \bar{M}_i^a \cdot \bar{M}_j^b - D \sum_{i,a} (\bar{M}_{iZ}^a)^2 + T \sum_{i,a} (M_i^{a^2} + \frac{1}{4} M_i^{a^4} - \frac{5}{16} M_i^{a^6} + O(M^\nu)) \quad (16)$$

با استفاده از بسط فوریه می توانیم پاسخ میدان و ماتریس برهمکنش را به صورت زیر تعریف کنیم:

$$\bar{M}_i^a = \sum_q \bar{M}_q^a e^{i\vec{q} \cdot \vec{R}_i^a}, \quad (17)$$

$$J_q^{ab} = \sum_{i,j} J e^{i\vec{q} \cdot (\vec{R}_i^a - \vec{R}_j^b)}. \quad (18)$$

همان گونه که مشاهده می شود انرژی آزاد همانند حالت همسانگرد [۲۱] تابع M است. اکنون با استفاده از روش موريسن، هریس و برلینسکی<sup>۱</sup> [۲۶ و ۲۱] سعی می کنیم تا انرژی آزاد سیستم را به شکلی قابل تحلیل در آوریم. اکنون می توان انرژی آزاد را با استفاده از دو معادله بالا بر حسب M در فضای فوریه به صورت زیر نوشت:

$$(\bar{S}_i^a \cdot \bar{Z}_a)^2 = \left[ (\bar{S}_i^a - \bar{M}_i^a) \bar{Z}_a + \bar{M}_i^b \cdot \bar{Z}_a \right]^2 = \nu \bar{M}_{iZ}^a (\bar{S}_i^a \cdot \bar{Z}_a) - \bar{M}_i^{a^2} + O(\delta S^2), \quad (7)$$

که در آن  $\bar{M}_i^a = \langle \bar{S}_i^a \rangle$  متوسط هنگردی اسپینها و مقدار متوسط هنگردی اسپینها در راستای ناهمسانگردی و  $\delta S = (\bar{S}_i^a - \bar{M}_i^a)$  جمله افت و خیز اسپینها است. در این مسئله از مراتب بالاتر افت و خیز صرف نظر می کنیم. در نهایت با استفاده از این تقریب تابع پارش به صورت زیر در می آید:

$$Z = e^{-\beta \left( \frac{J}{\nu} \sum_{ij} \sum_{a,b} \bar{M}_i^a \cdot \bar{M}_j^b - D \sum_{i,a} \sum_{b \neq a} \bar{M}_{iZ}^b \right)} \prod_{i,a} \int e^{\beta \bar{B}_i^a \cdot \bar{S}_i^a} d\bar{S}_i^a, \quad (8)$$

که در آن  $\bar{B}_i^a = J \sum_{b \neq a} \bar{M}_j^b + \nu D M_{iZ}^a \hat{Z}^a$ . اکنون به راحتی با استفاده از تابع پارش می توان انرژی آزاد سیستم را به دست آورد:

$$F(T,D) = -k_B T \text{Ln}(Z) = \frac{J}{\nu} \sum_{i,a} \bar{M}_i^a \cdot \bar{M}_j^b - D \sum_{i,a} (\bar{M}_{iZ}^a)^2 - \sum_{i,a} K_B T \text{Ln} C_i(\bar{B}_i^a, D) \quad (9)$$

که در آن  $C_i(\bar{B}_i^a, D) = \int e^{-\beta \bar{B}_i^a \cdot \bar{S}_i^a} d\bar{S}_i^a$  برای محاسبه  $C_i(\bar{B}_i^a, D)$  به ناچار باید انتگرال زیر را با استفاده از توابع بسل تعمیم یافته محاسبه کنیم:

$$\int e^{-\beta \bar{B}_i^a \cdot \bar{S}_i^a} d\bar{S}_i^a = \int_0^{2\pi} e^{-\beta B_i^a S_i^a \cos \phi_i^a} d\phi_i^a = \nu \pi \text{Ln}(-\beta B_i^a) \quad (10)$$

اکنون با جاگذاری  $B_i^a = |B_i^a|$  می توان انرژی آزاد سیستم را در واحد  $K_B$  به صورت زیر باز نویسی کرد:

$$F = -T \text{Ln} Z = \frac{J}{\nu} \sum_{i,j} \sum_{a,b} \bar{M}_i^a \cdot \bar{M}_j^b - D \sum_{i,a} (\bar{M}_{iZ}^a)^2 - T \sum_{i,a} \text{Ln}(I_0(-\frac{B_i^a}{T})). \quad (11)$$

با استفاده از انرژی آزاد میدان میانگین می توانیم آنتروپی و تابع پاسخ میدان را به صورت زیر به دست آورد:

۱. Berlinsky, Harris, Mouritson

حال می توان ماتریس برهمکنش را برای به دست آوردن ویژه مقادیر انرژی با استفاده از یک ماتریس  $U$  قطری کرد. برای این منظور رابطه (۱۴) را با استفاده از معادله زیر:

$$M_q^a = \sum_i U_q^{ai} \phi_q^i, \quad (23)$$

که در آن  $i$  نمایانگر شماره ویژه تابع ماتریس برهمکنش است، بازنویسی می کنیم تا در نهایت، انرژی آزاد به شکل زیر در آید:

$$f(T,D) = -\epsilon K_B T \ln(\epsilon \pi) + \frac{1}{\nu} \sum_q \sum_{i,j=1}^{\epsilon} \phi_q^i \cdot \phi_q^j (\nu T - \lambda_q^i) \times \sum_a U_q^{ai} U_q^{aj} + \frac{T}{\epsilon} \sum_{\{q\}} \sum_{ijkl} \phi_q^i \phi_q^j \phi_q^k \phi_q^l \times \sum_a U_q^{ai} U_q^{aj} U_q^{ak} U_q^{al} + \dots \quad (24)$$

که در آن  $\lambda_q^i$  ها ویژه مقادیرهای ماتریس برهمکنش  $\tilde{J}$  پس از قطری کردن با ماتریس  $U_q^{bi}$  هستند

$$\sum_b (J + \nu D)^{ab} U_q^{bi} = \lambda_q^i U_q^{ai}. \quad (25)$$

اکنون به راحتی از معادله (۲۴) می توان تشخیص داد حالت پایه سیستم حالت متناظر با بزرگترین ویژه مقدار ماتریس  $\tilde{J}$  است.  $\tilde{J}$  دارای شش ویژه مقدار است که در حالت  $D=0$  به صورت دو به دو با هم مساوی هستند (شکل های ۳ و ۴). در این حالت عملاً سیستم سه تراز انرژی با تبهگنی دوگانه دارا است. بالاترین خط  $\lambda_q$  نمایانگر تراز پایه سیستم است، چرا که در به دست آوردن تراز پایه ویژه مقداری که انرژی آزاد سیستم را کمینه می سازد حائز اهمیت است. با توجه به جمله  $(\nu T - \lambda_{qm}^i)$  بیشترین ویژه مقدار معرف حالت پایه است. مشاهده می شود که برای  $D=0$  ویژه مقدار متناظر با حالت پایه در  $q=0$  برابر با  $-\nu J$  و دارای تبهگنی دوگانه است. شکل ۳ مربوط به نمودار ویژه مقادیر انرژی بر حسب  $q$  در جهت (۰۱) و شکل ۴ مربوط به جهت (۱۱) است. با افزایش  $D$  ویژه مقادیرها از یکدیگر جدا

$$\frac{F(T,D)}{N} = f(T,D) = -\epsilon K_B T \ln(\epsilon \pi) + \frac{1}{\nu} \sum_q \sum_{ab} \bar{M}_q^a \cdot \bar{M}_q^b (\nu T \delta^{a,b} - J_q^{a,b} - \nu D^a \delta^{a,b}) + \frac{T}{\epsilon} \sum_a \sum_{\{q\}} \bar{M}_q^a \bar{M}_q^a \bar{M}_q^a \bar{M}_q^a + \frac{\delta T}{\nu \epsilon} \sum_a \sum_{\{q\}} \bar{M}_q^a \cdot \bar{M}_q^a \bar{M}_q^a \cdot \bar{M}_q^a \bar{M}_q^a \cdot \bar{M}_q^a + \dots \quad (19)$$

که در آن  $D^a$  و  $\sum_{\{q\}} = \sum_{q_1 \dots q_n} \delta(q_1 \dots q_n)$  ماتریس  $2 \times 2$  مربوط به جهت های ناهمسانگردی است.

اگر سه جهت  $\hat{Z}_\nu = \left( -\frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)$ ,  $\hat{Z}_1 = \left( \frac{\sqrt{3}}{2}, -\frac{1}{2} \right)$  و  $\hat{Z}_3 = (0,1)$  را به عنوان جهت های ناهمسانگردی در نظر بگیریم، ماتریسهای  $D^a$  به صورت زیر به دست می آیند:

$$D^{(\nu)} = D \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & -\frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}, \quad D^{(3)} = D \begin{bmatrix} 0 & 0 \\ 0 & 1 \end{bmatrix}, \quad (20)$$

$$D^{(1)} = D \begin{bmatrix} \frac{\sqrt{3}}{2} & \frac{\sqrt{3}}{2} \\ \frac{1}{2} & \frac{1}{2} \end{bmatrix}.$$

اکنون می توان ماتریس برهمکنش  $\tilde{J}$  را به صورت زیر تعریف کرد

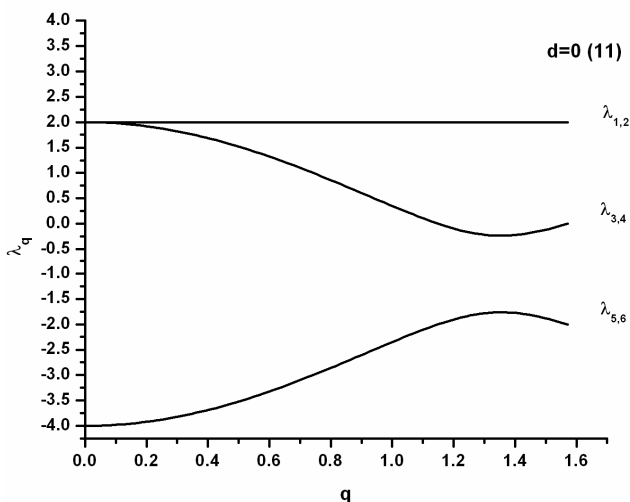
$$\tilde{J} = J_q + D = \begin{bmatrix} D^1 & J^12 & J^13 \\ J^12 & D^2 & J^23 \\ J^13 & J^23 & D^3 \end{bmatrix} \quad (21)$$

که در آن

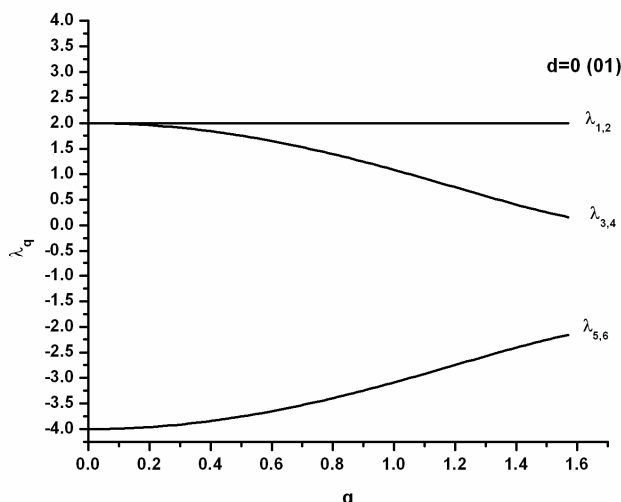
$$J^12 = \nu J \cos\left(\frac{q_x}{2}\right) I_{\nu \times \nu},$$

$$J^13 = \nu J \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_y + q_x}{2}\right) I_{\nu \times \nu}, \quad (22)$$

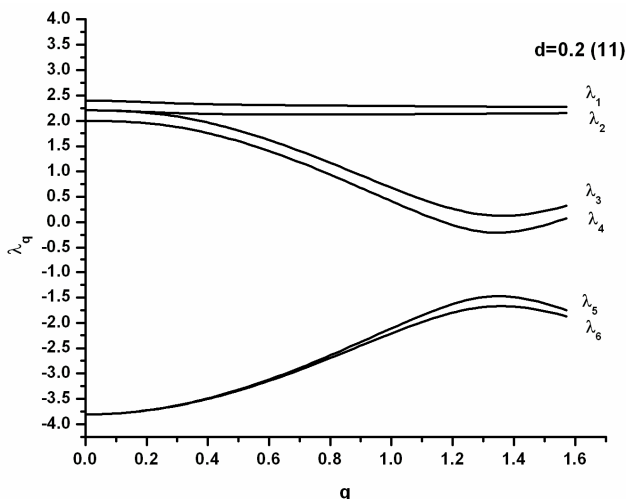
$$J^23 = \nu J \cos\left(\frac{\sqrt{3}q_y - q_x}{2}\right) I_{\nu \times \nu}.$$



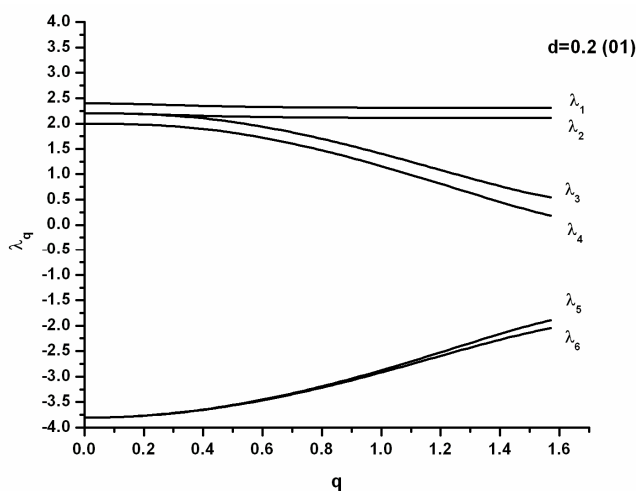
شکل ۳. ب) شش ویژه مقدار ماتریس برهمکنش در جهت (۱۱) برای  $D=0$



شکل ۳. الف) شش ویژه مقدار ماتریس برهمکنش در جهت (۰۱) برای  $D=0$



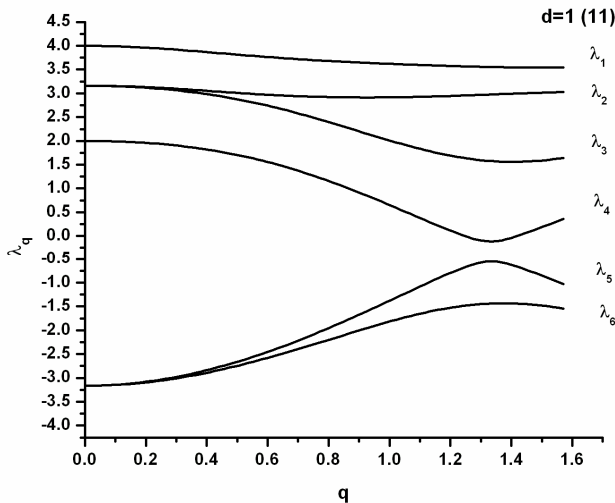
شکل ۴. ب) شش ویژه مقدار ماتریس برهمکنش در جهت (۱۱) برای  $D=0.2$



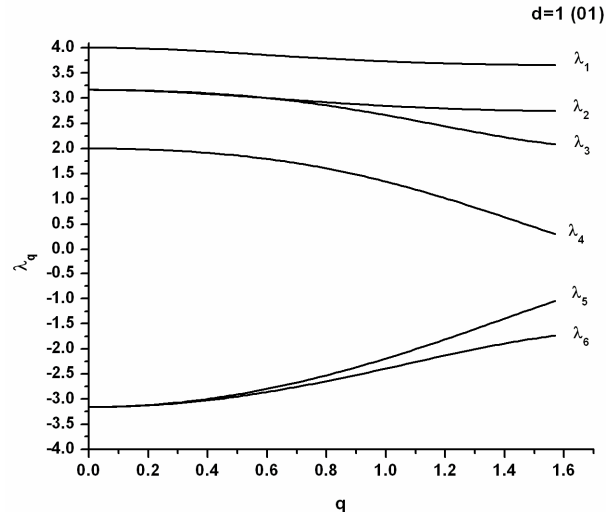
شکل ۴. الف) شش ویژه مقدار ماتریس برهمکنش در جهت (۰۱) برای  $D=0.2$

عامل ناهمسانگردی  $D$  مقدار ویژه حالت بیشینه در  $q=0$  افزایش یافته و مقداری برابر با  $\lambda=2(D-J)$  اختیار می‌کند که این ویژه مقدار دقیقاً متناظر با ویژه برداری در راستای ناهمسانگردی است. رابطه (۲۴) دمای گذار را برای سیستم با توجه به ویژه مقدار بیشینه  $T_C = (D-J)$  پیش‌بینی می‌کند. اما ویژه حالت دیگری که از نظر فیزیکی حائز اهمیت است ویژه حالتی است که رفتار آن مستقل از  $D$  است و با تغییر مقدار  $D$  هیچ گونه انحرافی از حالت اولیه بروز نمی‌دهد.

می‌شوند (شکل ۵). در شکل ۵ نیز ویژه مقدارها بر اساس  $q$  در دو جهت (۰۱) و (۱۱) رسم شده‌اند، مشاهده می‌شود که با غیر صفر شدن  $D$  از دو تراز تبهگن حالت پایه یک حالت بالاتر آمده و به عنوان حالت پایه جدید بلور را از گیجی مغناطیسی خارج می‌کند. البته ویژه مقدارها توابع پیچیده‌ای از  $q$  هستند که امکان محاسبه تحلیلی آنها وجود ندارد و ناگزیر برای به دست آوردن آنها از حل عددی معادلات باید کمک گرفت. اما با کمی دقت می‌توان دریافت پس از غیر صفر شدن



شکل ۵. ب) شش ویژه مقدار برهمکنش در جهت (۱۱) برای  $D=1$ .



شکل ۵. الف) شش ویژه مقدار برهمکنش در جهت (۰۱) برای  $D=1$ .

ازای یک  $\lambda_q^i$  خاص منفی است مقدار کمینه به ازای مقدار غیر صفر  $\phi_q^i$  حاصل می شود. این به معنی شکست خودبه خودی تقارن در نقطه  $\lambda_q^i - T = 0$  است. از طرف دیگر با کاهش دما اولین بار این اتفاق در مدی رخ می دهد که بزرگترین  $\lambda_q^i$  را دارد. بنابراین می توان گذار را به اولین مدی که با کاهش دما برایش شکست خودبه خودی تقارن رخ می دهد، مربوط دانست. با توجه به مقدار بیشینه  $\lambda_q^i$  می توان دمای گذار را به شکل زیر تعریف کرد:

$$T_c = \frac{1}{\gamma} \text{Max}_{q,i} \{ \lambda_q^i \} \quad (27)$$

اکنون دو حالت  $D=0$  و  $D>0$  را جداگانه بررسی می کنیم. ویژه مقدار ماتریس جفت شدگی  $\tilde{T}$  برحسب  $q$  برای  $D=0$  در شکل ۳- الف در جهت (۱۰) و ۳- ب در جهت (۱۱) رسم شده است. همان طور که مشاهده می شود بیشینه ویژه مقادیر در این حالت بدون پاشندگی (مستقل از  $q$ )، دارای تبهگنی دوگانه به ازای هر  $q$  می باشد. بنابراین دمای گذار به ازای تعداد زیادی مد حاصل می شود و این به معنی ناکامی در تعیین حالت پایه دستگاه فیزیکی است.

اما در حالت  $D>0$  یک پاشندگی در اولین شاخه دیده می شود و از طرفی تبهگنیا نیز شکافته می شوند. که پاشندگی و

ویژه بردار متناظر با این ویژه مقدار همان جهت عمود بر ناهمسانگردی است. مقدار این ویژه حالت نیز در  $q=0$  برابر با  $(-2J)$  است.

اکنون می توانیم در مورد کیفیت گذار سیستم به بحث بپردازیم. تعیین کیفیت گذار کاملاً وابسته به تأثیر شاخه های پایین تر بر ویژه مقدار حالت پایه ماتریس  $\tilde{T}$  است. زیرا که گذار مورد نظر در این مسئله، همان گذار سیستم از حالات برانگیخته به حالت پایه یعنی بیشترین ویژه مقدار است. بنابراین فاصله تراز پایه با سایر ترازها یا همان بالاترین ویژه مقدار انرژی با سایر ویژه مقادیر انرژی در تعیین نوع گذار بسیار مؤثر است. اکنون برای تحلیل کیفی مسئله، انرژی آزاد را با تقریب گوسی به صورت زیر بازنویسی می کنیم.

$$f(T,D) = -\epsilon K_B T \ln(\epsilon \pi) + \frac{1}{\gamma} \sum_q \sum_{ij} \phi_q^i \cdot \phi_q^j (\epsilon T - \lambda_q^i) \times \sum_a U_q^{ai} U_{-q}^{aj} + \frac{T}{\epsilon} \left( \frac{\epsilon}{\gamma} \right) \sum_{\{q\}} \sum_{kl} \sum_a (U_q^a)^2 U_q^{ak} U_{-q}^{al} \phi_q^k \phi_{-q}^l (\phi_q)^2 + \dots \quad (26)$$

از معادله بالا چنین برمی آید که ضریب جمله مجذوری برابر با  $\epsilon T - \lambda_q^i$  است. تا وقتی که این ضریب مثبت است، انرژی آزاد به ازای  $\phi_q^i = 0$  کمینه می شود. در حالی که وقتی این ضریب به



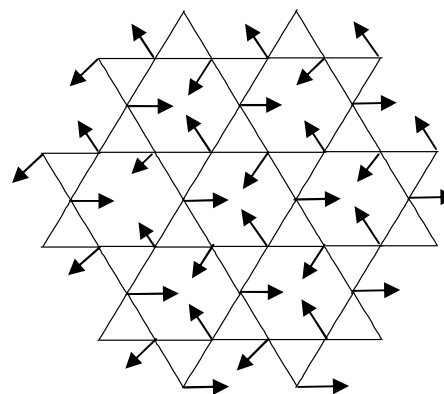
شده است. آرایش اسپینها در این حالت عمود بر جهت‌های ناهمسانگردی خواهد بود. در شکل ۶ شمایی کلی از این حالت به نمایش در آمده است.

### ۵. نتیجه‌گیری

به طور خلاصه با استفاده از روش میدان میانگین به بررسی خواص بحرانی مدل XY بر روی شبکه دو بعدی کگومی که متشکل از مثلثهایی با گوشه مشترک هستند پرداختیم.

در حالتی که هیچ ناهمسانگردی در سیستم وجود نداشته باشد نشان داده شد که دستگاه اسپینی در یافتن حالتی با انرژی آزاد کمینه دچار ناکامی می‌شود و لذا هیچ نظم بلند بردی در سیستم به وجود نمی‌آید. ولی چنانچه ناهمسانگردی با هر شدتی در سیستم در جهت‌های محورهای آسان، و در راستای خط واصل رئوس، و مرکز مثلثها اعمال شود، در دستگاه اسپینی نظم بلند بردی که در آن آرایش اسپینها همگی به سمت مرکز یا خارج از مرکز مثلثها شکل گرفته ایجاد می‌شود.

در نظریه میدان میانگین این گذار مرتبه دوم یا پیوسته است ولی چنانچه اثر افت و خیزهای مدهای زیرین در نظر گرفته شود این گذار ممکن است به مرتبه اول تغییر کند. بررسی این اثر مستلزم روشهای دقیق‌تر مانند شبیه‌سازی مونت کارلو یا محاسبات گروه باز بهنجارش می‌باشد که موضوع تحقیقات آینده است که نتایج آن به زودی منتشر خواهد شد.



شکل ۶. نمایش جهت‌گیری اسپینها در راستای عمود بر جهت‌های ناهمسانگردی.

شکافتگی تبهگنیها با افزایش  $D$  زیاد می‌شود در شکل‌های ۴ و ۵ ویژه مقادیر به ترتیب برای  $D=0/2$  و  $D=1$  رسم شده‌اند. بیشینه  $\lambda_q^l$  در این حالت به ازای  $q$  به وقوع می‌پیوندد. این ویژه مقدار متناظر با حالتی است که همه اسپینها در جهت‌های محور نامتقارن آسان به سمت مرکز واحدهای مثلثی جهت‌گیری شده باشند (شکل ۱). بنابراین عملاً تبهگنی در تراز پایه سیستم از بین می‌رود و تنها یک حالت پایه برای سیستم باقی می‌ماند. نتیجه این شرایط از بین رفتن ناکامی و ایجاد نظم بلند برد در دستگاه است. اما مد جالب دیگری که در نمودارهای  $\lambda_q^l$  قابل مشاهده است مدی است که با وجود اعمال ضریب ناهمسانگردی ویژه مقدار انرژی آن، تغییری از خود نشان نمی‌دهد. این مد به عنوان  $\lambda^f$  در شکل‌های ۳ و ۴ و ۵ به وضوح نمایش داده

### مراجع

1. A Ramirez et al., *Nature* **399** (1999) 333.
2. J Snyder, J S Slusky, R J Cava and P Schiffer, *Nature* **413** (2001) 48.
3. J T Chalker et al., *Phys. Rev. Lett.* **68** (1992) 855.
4. C Waldtmann et al., *Eur. Phys. J. B* **2** (1998) 501.
5. S Sachdev, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 12377.
6. C Zeng and V Elser, *Phys. Rev. B* **51** (1995) 8318.
7. C Broholm et al., *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 3173.
8. D A Huse and A D Rutenberg, *Phys. Rev. B* **45** (1992) 7536.
9. S E Korshunov, *Phys. Rev. B* **65** (2002) 054416.
10. C R Wiebe, P L Russo, A T Savici, Y J Uemura, G J MacDougall, G M Luke, S Kuchta and J E Greedan, *J. Phys.: Condens. Matter* **17** (2005) 6469-6482.
11. J E Greedan, N P Raju, A S Wills, C Morin and S M Shaw, *Chem. Mater.* **10** (1998) 3058.
12. C Broholm et al., *Phys. Rev. Lett.* **65** (1990) 3173.
13. K Matan, D Grohol, D G Nocera, T Yildirim, A B Harris, S H Lee, S E Nagler and Y S Lee, arXiv.org: cond-mat/0507355
14. A S Wills, *Phys. Rev. B* **63** (2001) 064430.
15. T Inami et al., *Phys. Rev. B* **61** (2000) 12181.

22. N Goldenfield, *Lectures on phase transitions and the renormalisation group*, Addison-Wesley Publishing Company (1992).
23. D H Lee, R G Caflisch, J Joannopoulos and F Y Wu, *Phys. Rev. B* **29** (1984) 2680.
24. D H Lee, J Joannopoulos, J W Negel and D P Landau, *Phys. Rev. Lett.* **52** (1984) 433.
25. S Miashita and J Shiba, *J. Phys. Soc. Jpn.* **53**, 11 (1984) 45.
26. A B Harris, O G Moritson and A J Berlinsky, *Can. J. Phys.* **62** (1984) 915.
16. S H Lee et al., *Phys. Rev. B* **56** (1997) 8091.
17. M sato, X Yan and J E Greedan *Z Anorg. Allg. chem.* **540 / 541** (1986) 177.
18. M A Subramanian, CC Torardi, D C Johnson, J Panntier and A W sleight, *J Solid State Chem.* **72** (1998) 24.
19. J E Greedan, M sato, X Yan and F S Razavi, *J Solid State Commun.* **59** (1986) 895.
20. J N Reimers, J E Greedan, *J Solid State Chem.* **72** (1986) 390.
21. J N Reimers, A J Berlinsky and A-C Shi, *Phys. Rev. B* **43** (1991) 865–878.