

سیمای فاز مدل آیزینگ J_1 - J_2 در میدان عرضی روی شبکه شطرنجی:

روش شبکه های تانسوری درختی

حق شناس، رضا؛ صدرزاده، مرضیه؛ لنگری، عبدالله

دانشگاه فیزیک دانشگاه صنعتی شریف، خیابان آزادی، تهران

چکیده

در این مقاله با به کارگیری روش شبکه های تانسوری درختی به بررسی سیمای فاز مدل آیزینگ ناهمسانگرد با میدان عرضی روی شبکه شطرنجی می پردازیم. نشان می دهیم که یک فاز پلاکتی با شکست تقارن انتقالی در ناحیه میانی بسیار کوچکی از سیمای فاز بین فازهای نیل و همخط در میدان های پایین پدیدار می گردد. نقاط بحرانی مرزی بین این فازها را با استفاده از مانستگي، مشتقات انرژی و پارامترهای نظم موضعی (همچون پارامتر پلاکتی) بدست می آوریم. سپس با استفاده از روش مقیاسی اندازه محدود، نقطه ی گذار فاز را دزست در جایی که سیستم بیشترین درماندگی را تجربه می کند ($J_1=J_2$) بدست آورده و با روش های دیگر مقایسه می کنیم. نتیجه بدست آمده در توافق بسیار خوبی با دیگر نتایج گزارش شده می باشد. علاوه براین، روش شبکه تانسوری درختی بر خلاف روش مونته-کارلو که وجود یک فاز میانی نیل را پیش بینی می کند، تنها یک فاز پلاکتی را قبل از ورود به فاز پارامناطیس در میدان های بالا آشکار می سازد. این نتیجه در توافق خوبی با نتیجه روش عملگر خوشه ای نیز می باشد.

Phase diagram of J_1 - J_2 transverse field Ising model on the checkerboard lattice: A tree tensor network approach

Haghshenas, Reza; Sadrzadeh, Marzieh; Langari, Abdollah

Department of Physics, Sharif University of Technology, Tehran

Abstract

We study the phase diagram of the transverse field ising model on the J_1 - J_2 checkerboard lattice by relying on universal order quantities such as ground-state fidelity, magnetization, its derivatives and local order parameters. Our main objective has been to find the nature of phases when the system experiences the most frustration: we showed that there is a so-called plaquette ordered phase separated with different type of quantum phase transition from Neel, canted collinear, plaquette ordered solid and paramagnetic ones. Using finite-size scaling, we obtained critical point $\Gamma_c \sim 0.28$, which is in full agreement with that of recent studies of Quantum Monte-Carlo and plaquette operator approach. Nonetheless, Our calculations show that in contrast to previous studies, which predict an intermediate canted Neel phases, there is only one phase, i.e. plaquette ordered phase. This result is being confirmed by cluster operator approach.

مقدمه

سیستم یافت، اما حتی با دانستن این حالت، مشخصه یابی و محاسبه ی کمیت های فیزیکی مورد علاقه می تواند فرایندی بسیار پیچیده و غیر عملی باشد. از این رو، توسعه و معرفی رهیافت های جامع برای حل یک چنین مسائلی از اهمیت بسیار زیادی برخوردار است. در این راستا، حالت های شبکه های تانسوری به عنوان یک رهیافت نوید بخش نوین، برای پاسخ دادن به اینگونه مسائل مطرح شده است. در این رهیافت، حالت های

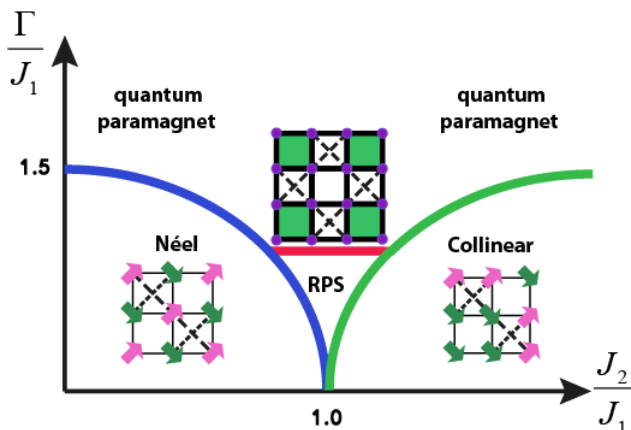
یافتن حالت پایه سیستم های بس ذره ای و مشخصه یابی ماهیت آن ها از سوالات اساسی فیزیک ماده چگال هستند. متأسفانه، رشد نمایی درجات آزادی (فضای هیلبرت) یک چنین سیستم هایی، مطالعه ی آنها را بسیار مشکل می سازد. اگر چه در موارد بسیار نادر، می توان یک جواب تحلیلی برای حالت واقعی

معرفی مدل

مدل آیزینگ در میدان عرضی روی شبکه شطرنجی با جفت شدگی پادرومغناطیس نزدیکترین همسایه J_1 و جفت شدگی پادرومغناطیس قطری J_2 (شکل 1) با هامیلتونی زیر نمایش داده می شود،

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} S_i^z S_j^z + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} S_i^z S_j^z - \Gamma \sum_i S_i^x \quad (1)$$

سیمای فاز کوانتومی مدل دارای فاز های متعددی است که به صورت شماتیک در شکل 1 نشان داده شده اند.



شکل 1 - شماتیکی از سیمای فاز حالت پایه کوانتومی مدل آیزینگ J_1 - J_2 در میدان عرضی روی شبکه شطرنجی. خطوط ممتد و خط چین به ترتیب باندهای J_1 و J_2 را نشان می دهند.

برای بدست آوردن این نمودار فاز به کمک روش شبکه تانسوری درختی [3]، که یک روش مشابه روش قطری سازی دقیق با دقت محدود است، از کمیت های متفاوتی همچون مشتق انرژی در مرتبه های مختلف، مانستگی حالت پایه و پارامتر نظم پلاکتی استفاده می کنیم. دقت انرژی محاسبه شده در بدترین شرایط از مرتبه 10^{-4} برای سیستم $8*8$ و 10^{-6} برای سیستم $6*6$ می باشد. برای بدست آوردن یک چنین دقتی ما بعد پیوند در شبکه های تانسوری را از مرتبه $\chi \sim 400$ انتخاب می کنیم. به هر جهت تمامی محاسبات با بعد پیوند های متفاوت مورد بررسی قرار می گیرد، تا وابستگی نتایج به این کمیت مورد ارزیابی درست قرار گیرد.

کوانتومی بر اساس ساختار درهمتنیدگی به صورت شبه کلاسیکی نمایش داده می شوند. این نمایش دارای دو مزیت اساسی است، (1) می توان روش های وردشی قدرتمندی برای مطالعه ی کمیت های فیزیکی مورد نظر طراحی کرد و (2) می توان به طور مستقیم ماهیت فاز های گوناگون را مورد بررسی قرار داد و به دسته بندی فاز های کوانتومی پرداخت. روش های عددی مبتنی بر حالت های شبکه تانسوری، قابلیت کاربردی بسیار بالایی دارند و می توانند برای مطالعه ی تقریباً تمامی سیستم های مورد علاقه امروزی استفاده شوند. برای مثال، روش کوانتوم مونته-کارلو به دلیل وجود مشکل علامت، قابلیت بررسی سیستم های الکترونی و درمانده را ندارد، با این وجود شبکه های تانسوری از این مشکل رنج نمی برند.

هدف ما در این پژوهش، مطالعه ی سیستم اسپینی آیزینگ J_1 - J_2 در میدان عرضی روی شبکه دو بعدی شطرنجی با روش عددی حالت شبکه تانسوری درختی و مشخصه یابی فاز های آن می باشد. با استفاده از پارامترهای نظم جهان شمول شبیه مانستگی حالت پایه، مغناطش و مشتق آن و پارامتر های نظم موضعی، سیمای فاز این مدل را مورد مطالعه قرار خواهیم داد. نشان می دهیم که درست در جایی که سیستم بیشترین درماندگی را تجربه می کند یک فاز پلاکتی در ناحیه بسیار کوچکی از نمودار فاز به وجود می آید که توسط گذار فاز های متفاوت از فاز های نیل، همخط¹ و پارامغناطیس کوانتومی جدا می شود. با استفاده از روش مقیاسی اندازه محدود²، نقطه ی گذار فاز را برابر با $\Gamma_c \sim 0.28$ پیش بینی کردیم. این نتیجه کاملاً منطبق با نتایج اخیر روش های کوانتوم مونته-کارلو و عملگر خوشه ای است [1,2]. با این وجود، محاسبات ما نشان می دهد، برخلاف مطالعات قبلی که وجود یک فاز نیل را پیش از ورود به حالت پارامغناطیس پیش بینی می کند، تنها فاز موجود در نقطه $J_1=J_2$ قبل از ورود به فاز پارامغناطیس کوانتومی، فاز پلاکتی است. این نتیجه منطبق با روش اختلالی خوشه ای نیز می باشد [2].

¹ collinear
² Finite size scaling

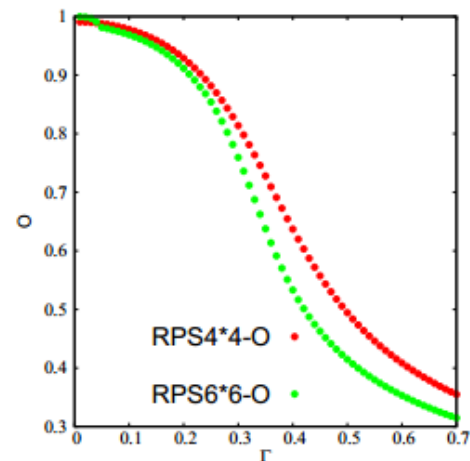
نتایج محاسباتی

در این بخش نتایج محاسباتی و شواهد خود را، به طور خلاصه، برای توجیه سیمای فاز شکل 1 بیان می کنیم. برای این کار، مسیر های متفاوتی بر روی سیمای فاز انتخاب کرده و کمیت های مورد نظر خود را محاسبه می کنیم. تمرکز عمده ی ما بر روی دو مسیر $(J_2/J_1=1, \Gamma)$ و $(J_2/J_1, \Gamma=0.2)$ خواهد بود.

برای اینکه ماهیت فاز پلاکتی را آشکار کنیم از پارامتر نظم پلاکتی استفاده می کنیم. این پارامتر به شکل رزنانس بین دو حالت نیل یک پلاکت به شکل زیر تعریف می شود:

$$\hat{O} = |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle\langle\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow| + |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle\langle\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow|. \quad (2)$$

هنگامی که در فاز پلاکتی هستیم، انتظار داریم مقدار این کمیت نزدیک به یک باشد. این کمیت برای حد $J_1=J_2$ در شکل 2 رسم شده است.

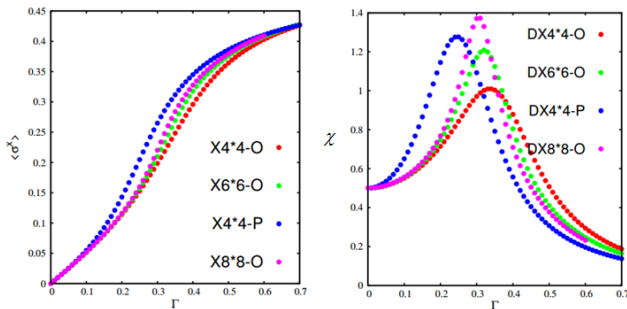


شکل 2- پارامتر نظم پلاکتی بر حسب میدان مغناطیسی عرضی.

مشاهده می شود که برای $\Gamma < 0.3$ این کمیت به سمت بیشینه مقدار خود میل می کند که نشانگر پیدایش یک فاز پلاکتی رزونانسی در میدان های پایین می باشد. پیش بینی این فاز پلاکتی، وجود یک گذار فاز کوانتومی از فاز پارامغناطیس کوانتومی به فاز پلاکتی را الزام آور می سازد. برای این که این گذار فاز را آشکار سازیم از مشتقات انرژی استفاده می کنیم. برای محاسبه ی غیر مستقیم مشتق دوم انرژی معادل با پذیرفتاری مغناطیسی می توان از رابطه ی (3) استفاده کرد.

$$\frac{\partial \langle H \rangle}{\partial \Gamma} = \langle \sigma^x \rangle \rightarrow \chi = \frac{\partial \langle \sigma^x \rangle}{\partial \Gamma} = \frac{\partial^2 \langle H \rangle}{\partial \Gamma^2}. \quad (3)$$

بنابراین برای اینکار کافی است که مشتق اول مغناطش را محاسبه کنیم. ناپیوستگی این کمیت نشان دهنده گذار فاز کوانتومی است. مغناطش و مشتق مرتبه ی اول آن (پذیرفتاری مغناطیسی) برای شرایط مرزی متفاوت را می توان در شکل 3 مشاهده کرد.



شکل 3- مغناطش و پذیرفتاری مغناطیسی. O و P به ترتیب مربوط به شرایط مرزی باز و دوره ای می باشند.

قله ی مشتق مرتبه ی اول مغناطش با افزایش تعداد ذرات برای شرایط مرزی باز به سمت چپ متمایل می شود،

$$\Gamma_c^{4 \times 4} = 0.34, \quad \Gamma_c^{6 \times 6} = 0.31, \quad \Gamma_c^{8 \times 8} = 0.29$$

از طرفی، برای شرایط مرزی دوره ای این کمیت به سمت راست انتقال می یابد،

$$\Gamma_c^{4 \times 4} = 0.22, \quad \Gamma_c^{6 \times 6} = 0.24, \quad \Gamma_c^{8 \times 8} = 0.27$$

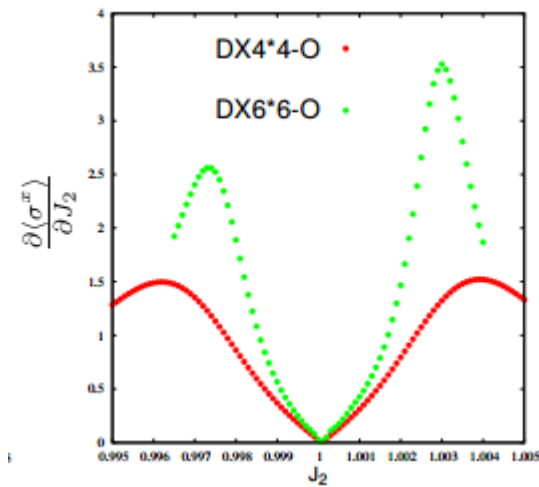
این مشاهده بیان می دارد که نقطه ی گذار فاز در بازه ی بین 0.27 تا 0.29 قرار می گیرد. برای بدست آوردن نقطه ی دقیق

گذار فاز از رابطه ی $\Gamma = \Gamma_c + \frac{a}{N}$ استفاده می کنیم. در اینجا a

یک کمیت ثابت است. این رابطه نحوه ی رفتار نقطه بحرانی را نسبت به تعداد ذرات سیستم نشان می دهد. می توان با استفاده از این معادله ی خطی مقادیر a و Γ_c را تعیین کرد. برای شرایط مرزی باز به دست می آوریم $\Gamma_c \sim 0.286$ و برای شرایط مرزی دوره ای $\Gamma_c \sim 0.276$. بنابراین می توان نقطه ی گذار فاز را در نهایت به شکل $\Gamma_c = 0.28 \pm 0.02$ گزارش کرد. مانستگی کوانتومی یکی از قویترین آشکار کننده های گذار فاز کوانتومی است، که می تواند تمامی گذار فاز های کوانتومی را مشخص کند و با رابطه زیر تعریف می شود،

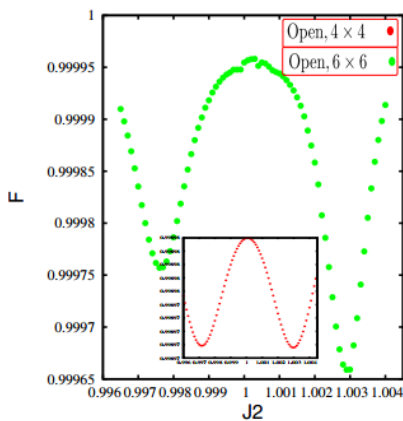
$$f_{\Gamma\delta} = \langle \Psi_{\Gamma} | \Psi_{\Gamma+\delta} \rangle. \quad (4)$$

کاهش می یابد (قله ها تیز تر می شوند) که نشان گذار فاز کوانتومی میان فاز های ذکر شده می باشد.



شکل 5- مشتق مغناطش نسبت به J_2

جابجایی قله ها با افزایش طول سیستم بسیار کوچک می باشد، از این رو به سختی می توان اثرات اندازه محدود را در این مطالعه پیش بینی کرد. به عبارت دیگر، تا دقت گزارش شده (10^{-3}) این قله ها حتی در حد ترمودینامیک دارای چنین مقادیری هستند. از طرف دیگر، محل این قله ها دقیقاً بر محل کمینه های مانستگی که با افزایش تعداد ذرات سیستم تیزتر می شوند، منطبق است (شکل 6).

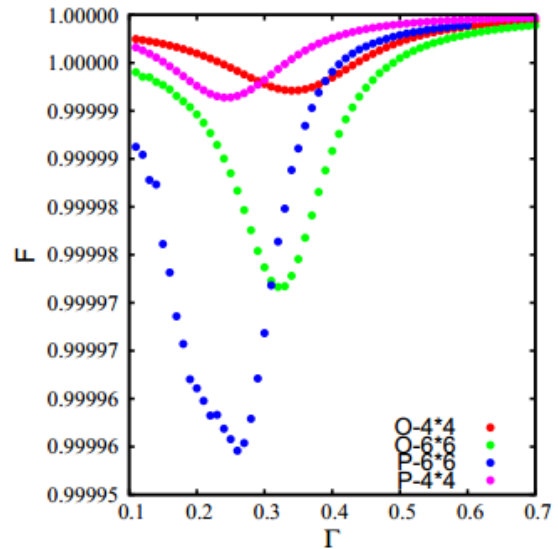


شکل 6- نمودار مانستگی نسبت به J_2

مرجع ها

- [1] Henry, Louis-Paul, and Tommaso Roscilde, *Physical review letters* 113.2 (2014): 027204.
- [2] Sadrzadeh, Marzieh, and Abdollah Langari, *European Physical Journal B* 88.10 (2015).
- [3] Verstraete, Frank, Valentin Murg, and J. Ignacio Cirac, *Advances in Physics* 57.2 (2008).

در شکل 4 می توان رفتار مانستگی را برای تعداد ذرات متفاوت مشاهده کرد.



شکل 4- مانستگی کوانتومی بر حسب میدان مغناطیسی برای اندازه های متفاوت شبکه و شرایط مرزی مختلف.

مکان کمینه ی مانستگی دقیقاً منطبق با مکان قله ی پذیرفتاری مغناطیسی می باشد. تنها یک کمینه در نمودار مانستگی مشاهده می شود که بدین معناست که در اینجا تنها یک گذار فاز از فاز پارامغناطیس کوانتومی به فاز پلاکتی وجود دارد. همچنین می توان با استفاده از نظریه مقیاسی اندازه محدود، مقدار نقطه ی بحرانی را در حد ترمودینامیک بدست آورد. عدد بدست آمده کاملاً مشابه با مقدار گزارش شده ی Γ_c می باشد که ما در اینجا از آوردن نمودار های آن اجتناب می کنیم.

حال اجازه دهید کمیت های فوق را برای مسیر $(J_2/J_1, \Gamma=0.2)$ محاسبه کنیم. انتظار داریم که در اینجا با دو نقطه ی گذار فاز مواجه شویم. سیستم از فاز نیل با یک گذار فاز مرتبه ی اول به فاز میانی پلاکتی گذار فاز انجام می دهد، سپس از طریق گذار فاز مرتبه ی دوم به فاز همخط وارد می شود. در شکل 5 می توان نمودار پذیرفتاری مغناطیسی را برحسب پارامتر J_2 ($J_1=1$) مشاهده کرد. همانطور که انتظار داریم در نمودار پذیرفتاری مغناطیسی دو قله ی پشت سرهم دیده می شود که با افزایش تعداد ذرات سیستم عرض آنها