

## حالت RVB بهینه در شبکه مربعی: حالت پایه و برانگیخته

زهرا نوربخش، فرهاد شهبازی و سیداکبر جعفری

دانشکده فیزیک، دانشگاه صنعتی اصفهان

(دریافت مقاله: ۱۵/۱۲/۸۶؛ دریافت نسخه نهایی: ۲۶/۹/۸۷)

### چکیده

ما در این مقاله ضمن معرفی فاز یا حالت یگانه ( $=\downarrow$ ) RVB، تابع موج وردشی RVB را به عنوان حالت پایه مدل هایزنبرگ با  $\frac{1}{2} = \downarrow$  و برهمنش پادفرومنغناطیس روی شبکه مربعی بررسی می‌کنیم. با معرفی پارامترهای وردشی مناسب، به طور عددی و با استفاده از روش مونت کارلوی وردشی انرژی حالت پایه، همبستگی اسپینی و طیف برانگیختگهای سه گانه ( $=\downarrow$ ) در فاز RVB را به دست آورد و نشان می‌دهیم انرژی حالت پایه RVB در شبکه مربعی  $\approx 35\%$  از انرژی نظم نیل در این شبکه کمتر است که نشانه وجود افت و خیزهای کوانتی ناشی از اصل عدم قطعیت هایزنبرگ است. نتایج ما از تابع موج RVB در توافق خوبی با نتایج سایر روشهاست.

**واژه‌های کلیدی:** نظریه تشدید پیوند ظرفیتی (RVB)، مدل هایزنبرگ، برهمنش پادفرومنغناطیس، روش مونت کارلو وردشی، شبکه مربعی

این مقاله ما تابع موج وردشی<sup>۱</sup> RVB را به عنوان حالت پایه

هامیلتونی هایزنبرگ در شبکه‌های دو بعدی با اسپین  $\frac{1}{2}$  معرفی می‌کنیم.

از لحاظ تاریخی تولد و موارد استفاده از RVB را باید در شیمی جستجو کرد. پاؤلینگ در سال ۱۹۳۳ حالت مایع گونه RVB را به جای گاز الکترونی در فلزات در نظر گرفت [۲] و فاز الکترونی جدیدی معرفی کرد که توانست عایق بودن بعضی از فلزات (فلز مات) را توجیه کند.. در فلز مات برهمنش شدید دافع کولنی باعث نارسانا شدن سیستمی با تعداد فرد الکترون می‌شود و قابل توصیف با مدل هایزنبرگ با برهمنش پادفرومنغناطیس است. این ارتباط موجب شد اندرسون در سال ۱۹۷۳ از RVB برای توصیف حالت پایه برهمنش پادفرومنغناطیس هایزنبرگ با  $\frac{1}{2} = \downarrow$  استفاده کند [۳].

از جمله مسائل بغرنج فیزیک ماده چگال یافتن حالت پایه بر هم کنش پادفرومنغناطیس با اسپین  $\frac{1}{2} = \downarrow$  در شبکه‌های دو بعدی با هامیلتونی هایزنبرگ به صورت زیر است.

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} S_i \cdot S_j \quad (1)$$

در این هامیلتونی معمولاً برهمنش نزدیکترین همسایه‌ها را در نظر می‌گیرند و برای همسایه‌های دورتر  $= J$  فرض می‌شود. در سیستمهای اسپینی، اهمیت افت و خیزهای کوانتی ناشی از اصل عدم قطعیت هایزنبرگ با کاهش بعد و اندازه اسپین زیاد می‌شود، به طوری که در یک بعد حل دقیق هامیلتونی هایزنبرگ نشان می‌دهد افت و خیزهای کوانتی مانع رسیدن سیستم به نظم است [۱]. سیستمهای سه بعدی با اسپین بزرگتر از  $\frac{1}{2}$  نیز به صورت آزمایشگاهی و نظری شناخته شده‌اند و حالت پایه این سیستمهای به نظم نیل نزدیک است. در

احتمال  $(i_1, j_1) h(i_1, j_1)$  را نشان می‌دهد.

برای رعایت قاعدة علامت تابع موج، اسپینها را از یک زیرشبکه به زیرشبکه دوم در نظر می‌گیریم. همچنین شبکه را غیر ناکام فرض کردیم. منظورمان از نبود ناکامی<sup>۲</sup> در نظر نگرفتن پیوند بین اسپینهای یک زیرشبکه است.

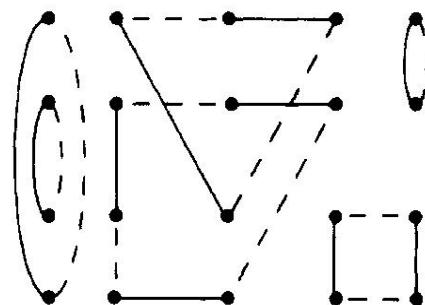
در رابطه (۲) کمیتی مثبت و تابع فاصله است؛ زمانی که کاهش  $h$  با فاصله شدید است سیستم در فاز بی نظم قرار دارد و زمانی که  $h$  مستقل از فاصله است یا تغییرات  $h$  با فاصله کند است در سیستم نظم نیل برقرار است. بنابراین توابع موج زیادی با وزن برابر وجود دارد و حالت پایه تشید بین همه این حالتهاست. این مسئله موجب می‌شود تابع موج RVB به عنوان یک تابع موج وردشی مطرح باشد که پارامترهای وردشی مناسب را نیز باید برای آن تعریف و بهینه کرد. در اینجا چگونگی تغییرات تابع  $h$  با فاصله را به عنوان پارامتر وردشی تابع موج برای بهینه کردن انرژی در نظر می‌گیریم.

شکل ۱ حلقه‌های ایجاد شده از برهم نهی دو پیکربندی یگانه و هم وزن  $|c_1\rangle$  و  $|c_2\rangle$  را نشان می‌دهد. حاصل برهم نهی  $\langle c_1 | c_2 \rangle$  برابر با  $= e^{N(c_1, c_2)} \langle c_1 | c_2 \rangle$  که  $N(c_1, c_2)$  تعداد حلقه‌های ساخته شده از برهم نهی  $c_1, c_2$  را نشان می‌دهد. همیستگی اسپینی در فاز RVB قانون ساده‌ای دارد: اگر اسپینهای  $i$  و زمتعملق به یک حلقه باشند  $\frac{3}{4} = \pm \frac{3}{4}$  است، علامت + مربوط به حالتی است که هر دو اسپین از یک زیرشبکه هستند و علامت منفی مربوط به حالتی که اسپینها از زیرشبکه‌های مختلف هستند و اگر اسپینهای  $i$  و زمتعملق به یک حلقه نباشند  $\langle c_1 | S_i \cdot S_j | c_2 \rangle = 0$  است.

### ۳. محاسبه مونت کارلو

انرژی حالت پایه برابر با

$$\begin{aligned} E_o &= \frac{\langle \Psi | H | \Psi \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} = \sum_{c_1, c_2} \frac{w(c_1) w(c_2) \langle c_1 | c_2 \rangle}{\langle \Psi | \Psi \rangle} \times \frac{\langle c_1 | H | c_2 \rangle}{\langle c_1 | c_2 \rangle} \\ &= \sum_{c_1, c_2} P(c_1, c_2) \times E(c_1, c_2) \end{aligned} \quad (3)$$



شکل ۱. برهم نهی دو پیکربندی  $|c_1\rangle$  ( نقطه چین ) و  $|c_2\rangle$  ( خطوط متند ).  $\langle c_1 | c_2 \rangle$  و  $\langle c_2 | c_1 \rangle$  دو پیکربندی یگانه اسپینی با وزن برابر هستند. همان‌طور که در شکل می‌بینیم از این برهم نهی ۶ حلقه ایجاد شده است. روشن است الکترون‌هایی که روی یک حلقه حرکت می‌کنند خاصیت رسانایی ندارند و فاز RVB در حالت پایه عایق است.

وی نشان داد حالت پایه شبکه مثلثی RVB است؛ همچنین نظریه RVB از موقتین نظریات در توجیه ابررسانایی دمای بالاست که در سال ۱۹۸۷ توسط اندرسون بیان شد [۴] و از آن زمان به بعد تعمیمهای و تغییرات بسیاری به آن وارد شد [۵]. لیانگ داکوت و اندرسون در مقاله‌ای تابع موج بلندبرد RVB را پیشنهاد کردند [۶] و نشان دادند تابع موج بلند برد RVB نسبت به تابع موج کوتاه برد آن توصیف بهتری از حالت پایه نشان می‌دهد. در اینجا ما ضمن مرور اجمالی این مقاله که از معتبرترین مقاله‌ها در زمینه RVB است، حالت برانگیخته را برای تابع موج RVB در شبکه مربعی بررسی می‌کنیم.

### ۲. تابع موج RVB

تنها شرطی که برای تابع موج RVB داریم، جفت شدگی اسپینها به صورت یگانه<sup>۱</sup> یا پادمتقارن در آن است. حالتهای زیادی وجود دارد که این شرط را فراهم می‌کند و تابع موج نهایی جمع روی تمام پیکربندیها است. تابع موج RVB را به صورت زیر تعریف می‌کنیم.

$$|\Psi_{RVB}\rangle = \sum_{i \in A} \sum_{j \in B} h(i_1, j_1) \dots h(i_n, j_n) (i_1, j_1) \dots (i_n, j_n) \quad (2)$$

$|\Psi_{RVB}\rangle = |\uparrow_{i,j}\rangle - |\downarrow_{i,j}\rangle$  وجود پیوند یگانه بین اسپینهای  $i$  و  $j$  با

یک دور شبکه را جاروب کرده باشد یعنی احتمال افت و خیز برای تمام اسپینهای شبکه برابر است. در ضمن برای اینکه زودتر به تعادل برسیم، پیکربندی اولیه را به صورت دایم را دوتایی در نظر می‌گیریم.

با توجه به اینکه در انرژی همبستگی نزدیکترین همسایه‌ها مهم است، رفتار کوتاه برد  $h$  در تعیین انرژی مهم است. ما بهینه انرژی را تحت دو پارامتر  $a_1 = \frac{h(5)}{h(3)}$  و  $a_2 = \frac{h(3)}{h(1)}$  برای تابع موج بلند برد به صورت  $h(l) = h(5) \left(\frac{5}{l}\right)^p$  و تابع موج کوتاه برد به صورت  $h(l) = h(5) a^{(l=5)}$  تعیین کردیم؛ که  $a$  و  $p$  نیز پارامترهای آزاد جهت بهینه کردن انرژی هستند و  $l$  فاصله منهتن<sup>۱</sup> بین دو اسپین را نشان می‌دهد که به صورت  $|x_i - x_j| + |y_i - y_j| = l$  است.

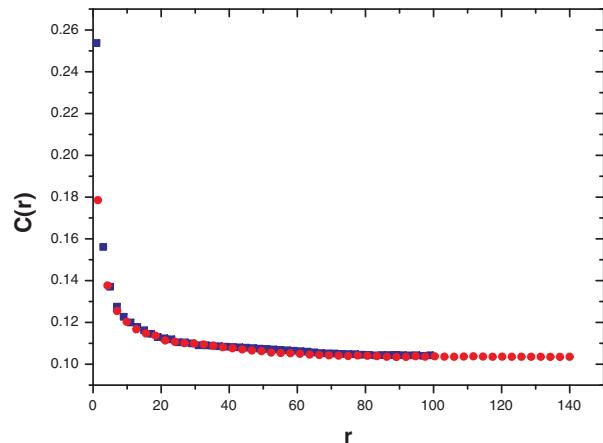
بهینه انرژی برای تابع موج کوتاه برد با سه پارامتر آزاد،  $a_1$  و  $a_2$  برابر با  $J = 6682(4)$  و برای تابع موج بلند برد با سه پارامتر  $a_1$ ،  $a_2$  و  $p$  بهینه انرژی برابر با  $E_0 = -0.6692(4) J$  به دست آمد. بنابراین تابع موج بلند برد توصیف بهتری از حالت پایه RVB ارائه می‌دهد.

این انرژیها در شبکه مربعی با اندازه  $64 \times 64$  حاصل شده است؛ نتایج برای شبکه  $32 \times 32$  نیز در همین بازه قرار دارند و خطای ناشی از محدود بودن اندازه کمتر از خطای آماری است؛ همچنین در محاسبات شرایط مرزی دورهای را در نظر گرفته‌ایم.

شکل ۲ نمودار همبستگی برای حالت بهینه تابع موج را نشان می‌دهد. همان طور که می‌بینیم تابع همبستگی از یک فاصله‌ای به بعد ثابت می‌شود و مستقل از اندازه و طول سیستم عمل می‌کند این رفتار نشانه وجود نظم بلند برد در سیستم است. با استفاده از نمودار همبستگی بر حسب  $r$ ، مغناطش به صورت زیر تعیین می‌شود ( $L$  اندازه شبکه را نشان می‌دهد).

$$C(r) = \langle S_i \cdot S_j \rangle \Rightarrow M = \sqrt{\lim_{r \rightarrow L/2} C(r)}. \quad (4)$$

با توجه به شکل ۲ مغناطش حالت پایه RVB در شبکه مربعی، برابر با  $M_{\max} = 0.32$  حاصل می‌شود که مغناطش



شکل ۲. همبستگی اسپینی  $\langle c_1 | S_i \cdot S_j | c_2 \rangle / \langle c_1 | c_2 \rangle$  در  $C_{i,j} = \sum_{c_1, c_2} P(c_1, c_2)$  در شرایط بهینه. • همبستگی در راستای افقی یا عمودی در شبکه مربعی را نشان می‌دهد. همان‌طور که در شکل می‌بینیم تقارن شبکه مربعی نسبت به راستای قطری و افقی باعث می‌شود، همبستگی در این دو راستا برابر باشد.

$$\text{اسنت} \leftarrow \prod_{\substack{i \in A \\ j \in B}} (i_1, j_1) \dots (i_n, j_n) |c\rangle \quad w(c) = \prod_{\substack{i \in A \\ j \in B}} h(i_1, j_1) \dots h(i_n, j_n) \quad \text{می‌باشد.}$$

$E(c_1, c_2)$  انرژی برهم‌نهی  $\langle c_1 | c_2 \rangle$  را نشان می‌دهد؛  $P(c_1, c_2)$  را می‌توان وزن این برهم‌نهی در نظر گرفت. با در نظر گرفتن  $P(c_1, c_2)$  به عنوان وزن متropolیس و با اعمال تنها  $10^5$  گام متropolیس می‌توانیم انرژی را با سرعت و دقیق بسیار خوبی تعیین کیم.

در محاسبات پیکربندی اولیه سیستم را به طور تصادفی انتخاب می‌کنیم یعنی هر اسپین از زیرشبکه اول به طور تصادفی با یک اسپین از زیرشبکه دوم جفت می‌شود. در قدم بعدی، اسپین  $i$  و یکی از همسایگان دوم آن، اسپین  $j$  را به طور تصادفی انتخاب می‌کنیم و جای اتصال بین آنها را عوض می‌کنیم یعنی  $\langle i, f(i) | j, f(j) \dots \rangle \rightarrow |c'\rangle = |(i, f(i))(j, f(j)) \dots \rangle$  و نسبت  $\frac{P(c'_1, c'_2)}{P(c_1, c_2)}$  را از رابطه (۳) حساب می‌کنیم. اگر این نسبت از عدد تصادفی  $r < 1$ ، بزرگتر بود با این تغییر موافقیت می‌کنیم. انرژی و سایر کمیتها را زمانی حساب می‌کنیم که متropolیس

اسپینی در فاز RVB را محاسبه کنیم. با توجه به اینکه متوسط اسپین در حالت یگانه RVB صفر است،  $\langle \Psi | S | \Psi \rangle = 0$ ، لذا در محاسبه همبستگی  $\langle c_1 | \sigma_z^{r'} S_i S_j \sigma_z^r | c_2 \rangle$  تنها سهم جملاتی غیر صفر است که یا هر چهار اسپین متعلق به یک حلقه باشند یا اسپینها دو به دو در یک حلقه باشند. بر این اساس برای همبستگی سه حالت وجود دارد:

۱. حالتی که  $\sigma_z$  و  $\sigma_z^{r'}$  در یک حلقه و  $S_i$  و  $S_j$  متعلق به حلقه دیگری هستند

$$\frac{\langle c_1 | \sigma_z^{r'} S_i S_j \sigma_z^r | c_2 \rangle}{\langle c_1 | c_2 \rangle} = \pm \frac{3}{4} \quad (7)$$

۲. حالتی که  $\sigma_z$  و  $S_i$  در یک حلقه و  $\sigma_z^{r'}$  و  $S_j$  متعلق به حلقه دیگری هستند

$$\frac{\langle c_1 | \sigma_z^{r'} S_i S_j \sigma_z^r | c_2 \rangle}{\langle c_1 | c_2 \rangle} = \pm \frac{1}{4} \quad (8)$$

علامت منفی مربوط به حالتی که سه اسپین از چهار اسپین از یک زیر شبکه باشند.

۳. حالتی که هر چهار اسپین متعلق به یک حلقه باشند.

شکل ۳ نمونه‌ای از این برانگیختگی را نشان می‌دهد. همان

طور که در شکل می‌بینیم دو برانگیختگی حلقه را به دو جزء

تقسیم می‌کند. در اینجا همبستگی برای اسپینهایی نظری

$$\frac{\langle c_1^* | S_1 S_2 | c_2^* \rangle}{\langle c_1^* | c_2^* \rangle} = -\frac{3}{4} \quad \text{که مربوط به یک جزء حلقه هستند به}$$

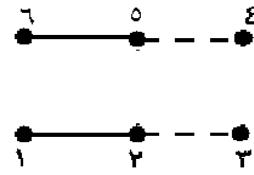
صورت یگانه و همبستگی برای اسپینهایی نظری

$$\frac{\langle c_1^* | S_5 S_6 | c_2^* \rangle}{\langle c_1^* | c_2^* \rangle} = \frac{1}{4} \quad \text{که مربوط به دو جزء حلقه هستند، به صورت سه گانه است.}$$

#### ۶. حالت برانگیخته در شبکه مربعی

انرژی حالت برانگیخته به صورت زیر است

$$E_k = \frac{\langle k | H | k \rangle}{\langle k | k \rangle} = \frac{\sum_{r,r'} \langle \Psi | \sigma_z^{r'} S_i S_j \sigma_z^r | \Psi \rangle \times e^{ik.(r-r')}}{\langle k | k \rangle} \\ = \sum_{c_1, c_2} \frac{w(c_1, c_2)}{\langle k | k \rangle} \times \sum_{r,r'} \langle c_1 | \sigma_z^{r'} S_i S_j \sigma_z^r | c_2 \rangle \times e^{ik.(r-r')} \quad (9)$$



$$\sigma_z^z |a\rangle = -|1,2\rangle \{3,4\} (5,6) \rangle$$

$$\sigma_z^z |b\rangle = -|4,5\rangle \{6,1\} \rangle$$

شکل ۳. اثر دو برانگیختگی در یک حلقه.

کل  $M_{\max} = 5$  است. بنابراین در حالت پایه شبکه مربعی ۶۵٪ نظم موجود است و افت و خیزهای کوانتمی موجب کاهش ۳۵٪ نظم در شبکه شده است.

#### ۴. برانگیختگی در فاز RVB

یک کاندیدا برای برانگیختگی کردن حالت پایه RVB، تبدیل یک جفت شدگی یگانه به سه گانه درتابع موج است. این حالت را به آسانی با اثر دادن عملگر اسپینی  $\sigma_l = x, y, z$ ،  $i = 1, 2, 3$  روی تابع موج می‌توان ایجاد کرد.

$$\sigma_i^z (i,j)_s = \sigma_i^z (\uparrow_i \downarrow_j) - (\uparrow_j \downarrow_i) = (\uparrow_i \downarrow_j) + (\uparrow_j \downarrow_i) = (i,j)_t \quad (5)$$

بنابراین تابع موج حالت برانگیخته در فضای وارون را می‌توان به صورت زیر تعریف کرد

$$|k\rangle = O_k |\Psi\rangle = \sum_r e^{ik.r} \sigma_z(r) |\Psi\rangle \quad (6)$$

و انرژی برانگیختگیها به صورت  $E_k = \frac{\langle k | H | k \rangle}{\langle k | k \rangle} - E_0$  است که  $E_0$  انرژی حالت پایه است.

#### ۵. همبستگی اسپینی در فاز برانگیخته

قبل‌آ همبستگی اسپینی برای حالت پایه RVB را بیان کردیم و گفتیم اگر اسپینهای  $i$  و  $j$  در یک حلقه نباشند  $\langle c_1 | S_i S_j | c_2 \rangle = 0$  است و اگر اسپینهای  $i$  و  $j$  متعلق به یک

$$\frac{\langle c_1 | S_i S_j | c_2 \rangle}{\langle c_1 | c_2 \rangle} = \pm \frac{3}{4} \quad \text{علامت} + \text{مربوط به حالتی}$$

است که هر دو اسپین از یک زیر شبکه هستند و علامت منفی مربوط به حالتی که اسپینها از زیر شبکه‌های مختلف هستند. برای تعیین همبستگی اسپینی در حالت برانگیخته به عبارت

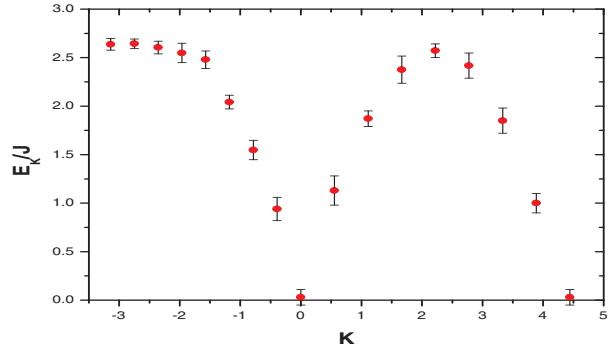
این مشکلات باعث می‌شود نتوانیم برانگیختگی را در شبکه‌هایی با اندازه بزرگ محاسبه کنیم. البته همان طور که قبلاً اشاره کردیم خطای ناشی از محدود بودن اندازه کمتر از خطای آماری است. نمودار ۴ انرژی پاییترین حالت برانگیخته شبکه مربعی با اندازه  $16 \times 16$  را نشان می‌دهد. قبل از محاسبه انرژی برانگیختگی بهینه سازی‌های لازم را روی شبکه انجام داده‌ایم.

## ۷. نتیجه‌گیری

در این مقاله حالت RVB را به عنوان یک تخمین وردشی از حالت پایه شبکه مربعی با برهم‌کش پادفرومنگناطیس و  $s = 1/2$  معرفی کردیم. بهینه انرژی را برابر با  $E_{\text{min}} = -0.6692(4)$  بدست آوردیم که  $35\%$  از انرژی نظام نیل در شبکه مربعی ( $E_N = -0.5J$ ) کمتر است. این مسئله وجود افت و خیزهای کوانتمی در شبکه را نشان می‌دهد. البته هر چند افت و خیزهای کوانتمی در حالت پایه موجود است؛ اما نظام بلند برد همچنان در شبکه برقرار است و مغناطش برابر با  $M = 0.32$  حاصل شد؛ به عبارت دیگر در شبکه  $65\%$  نظام برقرار است.

در مقاله موروری [۷] محاسبه انرژی و مغناطش با بیش از ۲۰ روش مختلف ارائه شده است؛ در این میان کمترین انرژی محاسبه شده [۸] برابر با  $J = 0.675(1)$  و مربوط به روش قطری کردن دقیق<sup>۲</sup> و بیشترین انرژی [۹] برابر  $J = 0.642$  با روش مونت کارلوی وردشی<sup>۳</sup> می‌باشد. همچنین این دو روش به ترتیب کمترین مغناطش،  $M = 0.25$ ، و بیشترین مغناطش،  $M = 0.43$ ، را در بین روش‌های مورد بررسی نشان داده‌اند. همچنین پیش‌بینی نظریه موج اسپینی از انرژی حالت پایه  $J = 0.6705$  و مغناطش  $M = 0.303$  است [۱۱]؛ تخمین بسط سری از انرژی  $J = 0.6692(3)$  و مغناطش  $M = 0.313$  است [۱۲] و انرژی و مغناطش از روش مونت کارلو تابع گرین  $J = 0.6692(2)$  و  $M = 0.34(1)$  به دست آمده است [۱۳].

هر چند شناسن RVB به عنوان حالت پایه شبکه مربعی زیاد نیست؛ اما توانست توصیف خوبی از حالت پایه ارائه دهد. البته



شکل ۴. انرژی پاییترین حالت برانگیخته در شبکه مربعی. جهت مثبت محور، بردار موج در راستای قطری و جهت منفی بردار موج در راستای افقی یا عمودی در فضای وارون شبکه مربعی را نشان می‌دهد. همان طور که شکل نشان می‌دهد در حالتی که نظم پادفرومنگناطیس در شبکه موجود است، در حد  $k = 0$  انرژی به صورت خطی به صفر میل می‌کند، که شبی خط متناسب با سرعت موج برانگیختگی سه گانه (حالت مقید دو اسپینونی) است.

در محاسبه این انرژی با استفاده از متروپلیس، انرژی و وزن برهم‌نهی پیکربندی  $\langle c_1^* | c_1^* \rangle$  به صورت

$$E_k(c_1^*, c_1^*) = \frac{\sum_{r,r'} \langle c_1 | \sigma_z^{r'} S_i S_j \sigma_z^r | c_1 \rangle \times e^{ik.(r-r')}}{\sum_{r,r'} \langle c_1 | c_1 \rangle \times e^{ik.(r-r')}}$$

$$P(c_1^*, c_1^*) = \sum_{c_1, c_1} \frac{w(c_1, c_1) \sum_{r,r'} \langle c_1 | \sigma_z^{r'} \sigma_z^r | c_1 \rangle \times e^{ik.(r-r')}}{\langle k | k \rangle}$$

حاصل می‌شود. می‌بینیم ضریب  $e^{ik.(r-r')}$  در وزن متروپلیس ظاهر می‌شود. یعنی برای هر  $k$  سیستم باید جداگانه به تعادل برسد. مشکل دیگری که در محاسبه انرژی برانگیختگی وجود دارد خطای محاسبه است. انرژی برانگیختگی به صورت  $\omega_k = E_k - E_0$  است.  $\omega_k$  اختلاف دو عدد بزرگ است، هر چند خطای نسبی در محاسبه  $E_0$  و  $E_k$  ناچیز است (در حدود  $0.0005$ )، اما خطای محاسبه  $\omega_k$  مجموع خطای مطلق این دو انرژی است. ضمن اینکه  $\omega_k$  نیز عدد کوچکی است و خطای نسبی در محاسبه انرژی برانگیختگی زیاد است.

مشکل دیگر زمان اجرای برنامه است. در محاسبه  $E_k$  نیاز به جمع زدن روی تمام اسپینهای شبکه را داریم.<sup>۱</sup>

۲. Exact diagonalization

۳. Variational Monte Carlo

۱. البته طبق بحثی که در بخش قبل داشتیم سهم بسیاری از برانگیختگیها صفر است و نیاز به محاسبه آنها نداریم.

نظریه موج اسپینی این رفتار به صورت شکست خود به خود تقارن و وجود مدهای گلدنستون<sup>۱</sup> در سیستم تعییر می‌شود. همچنین بی گاف بودن انرژی امکان وجود خاصیت رسانایی در حالت پایه تابع موج RVB را ایجاد می‌کند.

با پارامترهای وردشی بیشتر مسلمانی می‌توانیم به انرژیهای بهتری دست یابیم؛ همچنین اضافه کردن ناخالصی به سیستم نیز می‌تواند شانس RVB را افزایش دهد. بی گاف بودن انرژی در  $k = 0$  نشانه وجود برانگیختگیهای سه گانه (حالت مقید دو اسپینون) در سیستم است. در رهیافت

## مراجع

10. M Takahashi, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 2494.
11. G E Castilla and S Chakravarty, *Phys. Rev. B* **43** (1991) 13687.
12. R R P Singh, *Phys. Rev. B* **39** (1989) 9760.
13. J Carlson, *Phys. Rev. B* **40** (1989) 846.
14. زهرا نوربخش، پایان‌نامه کارشناسی ارشد "بررسی حالت پایه و برانگیخته RVB در شبکه‌های دوبعدی لانه زنیوری و مربعی" ، دانشگاه صنعتی اصفهان (۱۳۸۶).
1. L Hulthen, *Arc. Mat., Astron Phys.* **26A** (1938) 1.
2. L Pauling, *J. Chem. Phys.* **1** (1933) 280.
3. P W Anderson, *Matt. Res. Bull.* **8** (1973) 153.
4. P W Anderson, *Science* **235** (1987) 1196.
5. B Edegger, V N Muthucumar and C Gros, *Advances in Physics* **56** (2007) 927.
6. S Liang, B Doucot, P W Anderson, *Phys. Rev. Lett.* **61** (1988) 927.
7. E Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63** (1991) 1.
8. D Dagotto and A Moreo, *Phys. Rev. B* **38** (1988) 5087.
9. H Yokoyama and H Shiba, *J. Phys. Soc.* **56** (1987) 3570.

<sup>۱</sup>. Goldeston mode