

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

БАЛІГА Василь Ярославович

УДК 537.9, 537.622

ДИСЕРТАЦІЯ

ЕФЕКТИ ФРУСТРАЦІЙ У КВАНТОВИХ АНТИФЕРОМАГНЕТИКАХ ГАЙЗЕНБЕРГА НА ДВОШАРОВИХ ҐРАТКАХ

01.04.02 — теоретична фізика

(104 — фізика та астрономія)

10 — природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук

Дисертація містить результати власних досліджень. Використання ідей,
результатів і текстів інших авторів мають посилання на відповідне джерело

_____ В. Я. Баліга

Науковий керівник Держко Олег Володимирович, доктор фіз.-мат. наук

Львів — 2018

АНОТАЦІЯ

Балига В.Я. Ефекти фрустрацій у квантових антиферромагнетиках Гайзенберга на двошарових ґратках. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук (доктора філософії) за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 — Фізика та астрономія). — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2018.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга, які за певних умов мають бездисперсійну (плоску) зону в одночастинковому енергетичному спектрі. Модель досліджена в сильних магнітних полях та при низьких температурах.

Розглянуто $s = 1/2$ антиферромагнітну модель Гайзенберга на кількох двошарових ґратках (квадратна, шестикутна і трикутна) з магнонними станами з плоскої зони з найменшою енергією за наявності сильного магнітного поля. Для цих систем, через локалізований характер магнонних станів, здійснено відображення на класичні гази жорстких об'єктів. Таке відображення зводить вивчення квантових моделей до добре відомих класичних, які дозволяють зробити висновки про властивості вихідних моделей. Використано операторну теорію збурень у наближенні сильного зв'язку для побудови ефективних гамільтоніанів. Отримані ефективні моделі дозволили дослідити фазові переходи, пов'язані з впорядкуванням локалізованих магнонів. Ці фазові переходи належать до різних класів універсальності. Коли розглядалася повністю антиферромагнітна модель (квадратна та шестикутна геометрії) в режимі повної фрустрації, то виявлено фазові переходи, які належать до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. У випадку трикутної геометрії для повністю антиферромагнітної моделі виявлено фазовий перехід, що належить до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса, а в випадку, коли деякі взаємодії на ґратці є ферромагнітними — фазовий перехід першого роду, який у певній критичній точці переходить у фазовий пере-

хід другого роду з класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. Для повністю антиферромагнітної моделі заданої на шестикутній двошаровій ґратці при малих відхиленнях від режиму повної фрустрації виявлено спін-флоп перехід, який притаманний XXZ моделі з легкою віссю намагнічення.

На основі ефективної моделі розроблено теорію для магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у зовнішньому магнітному полі для опису її низькотемпературних властивостей. Сполука описується квадратною спіновою моделлю на квадратному двошарі. Відтворено результати експериментів для цієї сполуки та зроблено нові передбачення, які потребують експериментальних досліджень для їх підтвердження. Також обговорено застосовність розробленої теорії на основі квантової моделі Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці до магнітної сполуки $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$.

Для повноти картини, в роботі досліджено основний стан квантового антиферромагнетика Гайзенберга на двошарах різної геометрії (квадратна, шестикутна) за відсутності магнітного поля при $T = 0$. Для цього застосовано варіаційний підхід. Запропоновано пробні варіаційні хвильові функції, які добре описують стан системи при певних співвідношеннях між параметрами обмінних взаємодій. Із порівняння варіаційних енергій побудовано фазові діаграми. Отримані результати співставлено з недавно одержаними за допомогою складніших методів. Спостерігається якісна узгодженість та добра кількісна згода для деяких критичних точок.

Як простий приклад, розглянуто модель Тасакі-Габарда задану на пилкоподібному ланцюжку, де можна спостерігати ефекти присутності сильних кореляцій та найнижчої бездисперсійної (плоскої) зони в енергетичному спектрі. Вивчено властивості такого парамагнетика в нехтовно малому зовнішньому магнітному полі та здійснено порівняння зі звичайним парамагнетиком Кюрі. Виявлено, що на відміну від звичайного парамагнетика, в парамагнетику Тасакі-Габарда є залишкова ентропія. Також такий парамагнетик легше намагнічується.

У дисертації вивчено як впливають на властивості системи відхилення від режиму повної фрустрації та знак деяких обмінних взаємодій. Для однієї з моде-

лей досліджено систему в магнітному полі з довільним напрямком. Застосовано операторну теорію збурень у випадку некомутуючого з повним гамільтоніаном доданку Зеємана.

Ключові слова: квантовий антиферромагнетик Гайзенберга, двошар, геометрична фрустрація, бездисперсійна (плоска) зона, локалізовані стани, фазовий перехід

ABSTRACT

Baliha V. Y. Effects of frustration in quantum Heisenberg antiferromagnets on bilayer lattices. — Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Philosophy in Physics and Mathematics on the speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 — Physics and Astronomy). — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2018.

The thesis is devoted to investigation of the properties of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets, which under special conditions have a dispersionless (flat) band in the one-particle energy spectrum. The model is investigated in strong magnetic fields and at low temperatures.

An $s = 1/2$ antiferromagnetic Heisenberg model on several bilayer lattices (square, honeycomb and triangular) with magnon states from the flat band with lowest energy in the presence of a strong magnetic field is considered. Due to the localized nature of the flat-band magnon states, these systems are mapped on the classical lattice gases of hard-core objects. This mapping simplified the study of quantum models, reducing them to well-known classical ones, which allows us to draw the conclusions about the properties of the initial models. Also, the standard strong-coupling perturbation theory is applied for constructing effective Hamiltonians. These effective models allowed to investigate the phase transitions related to the ordering of localized magnons. These phase transitions belong to the different classes of universality. When completely antiferromagnetic model (square and honeycomb geometry) was considered in full frustration regime, the phase transitions that belong to the universality class of the two-dimensional Ising model were found. In the case of triangular geometry, for a completely antiferromagnetic model, the phase transition belonging to the universality class of the two-dimensional three-state Potts model, and in the case, when some interactions on the lattice are ferromagnetic — the discontinuous phase transition, which at a certain critical point reached the continuous phase transition from the universality class of the two-dimensional Ising model were

found. For a completely antiferromagnetic model on a honeycomb bilayer lattice for a small deviations from the full frustration regime, a spin-flop transition, which occurs in a XXZ model with an easy axis of magnetization, was found.

On the basis of an effective model, a theory for a magnetic compound $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ in an external magnetic field for the description of its low-temperature properties is developed. The compound can be described as a quantum spin model on a square bilayer lattice. The results of experiments for this compound have been reproduced and new predictions have been made, which require new experimental studies to confirm them. The applicability of the developed theory based on the Heisenberg quantum model on a honeycomb bilayer lattice to the magnetic compound $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ is also discussed.

For completeness, the ground state of the quantum Heisenberg antiferromagnet on the bilayers with different geometries (square, honeycomb) in the absence of magnetic field is investigated. A variational approach has been applied for that. The trial variational wave functions, which describe the state of the system for the certain relations between exchange interaction parameters, are proposed. By comparing the variational energies, the ground-state phase diagrams are constructed. The obtained results are compared with obtained recently by more sophisticated methods. Qualitative consistency and good quantitative agreement for some critical points are observed.

As a simple example, the Tasaki-Hubbard model on a sawtooth chain, where one can observe the effects of the presence of strong correlations and the lowest dispersionless (flat) band in the energy spectrum is considered. The properties of such a paramagnet in an infinitesimally small external magnetic field are studied and a comparison with the usual Curie paramagnet is made. It is found that in contrast to the usual paramagnet, the Tasaki-Hubbard paramagnet has a residual entropy. Also, such a paramagnet is more easily to magnetize.

In the thesis, the influence of the deviation from the full frustration regime and the sign of some exchange interactions on the system properties is studied. For one of the spin models, the system is investigated in a magnetic field with an arbitrary

direction. The perturbation theory is extended to the case, when full Hamiltonian does not commute with the Zeeman term.

Keywords: quantum Heisenberg antiferromagnet, bilayer, geometric frustration, dispersionless (flat) band, localized states, phase transition

Список публікацій здобувача

1. Baliha V., Richter J., Derzhko O. One-Dimensional Tasaki-Hubbard Model in Paramagnetic Limit // *Acta Physica Polonica A*. — 2017. — Vol. 132, no. 4. — P. 1256–1260.
2. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field: Unconventional phase transitions in a two-dimensional isotropic Heisenberg model / T. Krokhmalskii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, J. Richter // *Phys. Rev. B*. — 2017. — Vol. 95, no. 9. — P. 094419 : 1–11.
3. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field / T. Krokhmalskii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, J. Richter // *Physica B*. — 2018. — Vol. 536. — P. 388–391.
4. Thermodynamic properties of $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ in a strong magnetic field: Realization of flat-band physics in a highly frustrated quantum magnet / J. Richter, O. Krupnitska, V. Baliha, T. Krokhmalskii, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. — 2018. — Vol. 97, no. 2. — P. 024405 : 1–7.
5. Baliha V., Richter J., Derzhko O. Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnets. — Lviv, 2018. — 8 p. — (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-18-05E).
6. Ising versus Potts criticality in low-temperature magnetothermodynamics of a frustrated spin-1/2 Heisenberg triangular bilayer / J. Strečka, K. Karlová, V. Baliha, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. — 2018. — Vol. 98, no. 17. — P. 174426 : 1–14.
7. Баліга В. Парамагнетик Тасаки-Габарда // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 9–10 червня 2016. — Львів, 2016. — С. 31.
8. Баліга В. Квантовий антиферромагнетик на фрустрованому подвійному шарі

з шестикутних ґраток у зовнішньому магнітному полі // XVII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 8–9 червня 2017. — Львів, 2017. — С. 23.

9. Баліга В. Квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на двошарових ґратках. Варіаційний підхід // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 7–8 червня 2018. — Львів, 2018. — С. 36.
10. Baliha V. Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg anti-ferromagnets // IX Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics". Book of Abstracts, Kyiv, December 4–5, 2018. — Kyiv, 2018. — P. 16.

ЗМІСТ

Вступ	12
1 Плоскі зони, локалізовані стани, сильні кореляції. Дволанцюги й двошари	20
1.1 Геометричні фрустрації та бездисперсійні (плоскі) зони	20
1.2 Одновимірна модель Тасакі-Габарда у парамагнітній границі	21
1.2.1 Механізм Мільке-Тасакі	21
1.2.2 Наявність нехтовно малого магнітного поля	23
1.3 Ґратки типу двошар	30
1.3.1 Експеримент	30
1.3.2 Теорія	35
2 Фазові діаграми квантового антифероманетика Гайзенберга на двошарах при $T = 0$ в нульовому магнітному полі	50
2.1 Квадратна двошарова ґратка	50
2.1.1 Область $J_1 \gg J_X$	50
2.1.2 Область $J_1 \approx J_X$	55
2.2 Шестикутна двошарова ґратка	61
2.2.1 Область $J_1 \gg J_X$	61
2.2.2 Область $J_1 \approx J_X$	63
2.3 Висновки	67
3 Термодинамічні властивості $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у сильному магнітному полі: реалізація плоскостонної фізики у сильно фрустрованому	

квантовому магнетику	68
3.1 Експерименти для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ і спінова модель	68
3.2 Ефективна модель у магнітному полі вздовж осі z	71
3.3 Ефективна модель у магнітному полі вздовж осі x	73
3.4 Пояснення наявних експериментальних результатів і нові теоретичні передбачення	76
3.5 Висновки	82
4 Низькотемпературні властивості квантової спінової шестикутної двошарової ґратки у магнітному полі	84
4.1 Незалежні і взаємодіючі локалізовані магнони	85
4.2 Жорсткі шестикутники на шестикутній ґратці	93
4.3 За межами концепції незалежних локалізованих магнонів	98
4.3.1 Інші взаємодіючі локалізовані магнони	98
4.3.2 Відхилення від ідеальної плоскостонної геометрії	100
4.4 Магнетотермодинаміка. Точна діагоналізація та квантове Монте Карло	104
4.5 Висновки	108
5 Квантова спінова трикутна двошарова ґратка у магнітному полі та модель шестикутників Бекстера	110
5.1 Спінова модель та її однамагنونний спектр	111
5.2 Ефективний гамільтоніан за наявності поля	116
5.2.1 Ґратковий газ	116
5.2.2 Теорія збурень	117
5.3 Жорсткі шестикутники на трикутній ґратці та модель Бекстера . .	119
5.4 Низькотемпературна термодинаміка	122
5.5 Висновки	127
Висновки	131

Список використаних джерел	133
А Список публікацій здобувача	145
Б Апробація результатів дисертації	147

ВСТУП

Актуальність теми. В фізиці твердого тіла спінові моделі використовуються для пояснення магнетизму. Такі моделі можуть бути як класичними, так і квантовими. Вони мають цікаві властивості, зокрема, фазові переходи між впорядкованими і неупорядкованими (звичайно, високотемпературними) фазами. Далекосяжне впорядкування, яке виникає у системі взаємодіючих спінів і приводить до магнетизму, може бути зруйноване навіть при $T = 0$ через конкуренцію різних взаємодій (фрустрацію). Фрустрація може бути викликана специфічною геометрією ґратки. Коли йде мова про квантові спінові моделі ($s = 1/2$), то до фрустрації додаються ще і квантові флюктуації, які теж руйнують далекий порядок, особливо, коли вимірність системи мала. Прикладами геометрично фрустрованих систем можуть слугувати антиферромагнетики Гайзенберга на двовимірній ґратці кагOME чи тривимірній ґратці пірохлору.

Важливий клас спінових моделей становлять квантові антиферромагнетики Гайзенберга на двошарових ґратках: вони складаються з двох антиферромагнітних шарів з антиферромагнітною міжшаровою взаємодією між найближчими сусідами, яка за певних умов визначає димери [1–4]. Двошарові антиферромагнітні ґратки представляють квантові багаточастинкові системи, в яких виникають всі явища, зумовлені геометричною фрустрацією обмінних взаємодій і квантовими флюктуаціями. Цікаво зазначити, що для деякого спеціального набору констант обмінних взаємодій у таких системах з'являється бездисперсійна (плоска) одномагнетонна зона з найнижчою енергією (ідеальна фрустрація і достатньо велика взаємодія у димерах).

З іншого боку, фрустровані двошарові ґратки можуть належати до так званих спінових систем із локалізованими магнонами [5], яким властива своєрідна

низькотемпературна термодинаміка в околі поля насичення. Зокрема, стрибок намагніченості при полі насичення в основному стані, скінченна залишкова ентропія при полі насичення, додатковий низькотемпературний пік у температурній залежності теплоємності в околі поля насичення, тощо [6–8]. Синглетний стан димера — це стан, який відповідає локалізованому магнону й належить повністю бездисперсійній (плоскій) одномагنونній зоні. Впродовж останнього десятиліття було виявлено велике різноманіття плоскостонних систем із незвичайними фізичними властивостями. Зокрема, плоскостонний феромагнетизм Мільке-Тасакі в одноорбітальній моделі Габарда [9–11]; див. також [12–15]. Локальна природа одномагنونних станів у плоскостонних системах дозволяє побудувати багатомангنونні локалізовані стани та обчислити кратність їхнього виродження, здійснюючи відображення вихідної системи на класичний ґратковий газ жорстких об'єктів. Випадок двошарових ґраток у такій перспективі обговорювався в [16–18]. У режимі сильних полів та низьких температур незалежні локалізовані магнони мають найнижчу енергію, і тому вони домінують у низькотемпературній термодинаміці.

Актуальність теми дисертаційної роботи визначається інтересом до плоскостонних систем за наявності сильних кореляцій і, зокрема, до фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга на двошарах. Розглянуті у дисертації моделі дозволяють детальне дослідження ефектів фрустрації в квантових спінових моделях. Наявність фрустрації приводить до локалізованих одностинкових станів і дозволяє побудувати багатостинкові стани, а тому дослідити фізичні властивості в термінах нетривіальних класичних моделей статистичної механіки. Також двошарові спінові моделі недавно використовувалися для випробування нових алгоритмів квантового Монте Карло, які застосовні в режимі повної фрустрації. Аналітичні розрахунки потрібні тут для перевірки нових числових методів. Двошарові моделі дозволяють пояснити результати експериментальних досліджень для магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [19]. Квантові спінові моделі Гайзенберга на двошарових ґратках передбачають існування фазових переходів у сильних магнітних полях, пов'язаних із впорядкуванням локалізованих магنونів.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Ди-

сертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт за темою "Квантові багаточастинкові ґраткові системи: динамічний відгук і ефекти сильних кореляцій" (2013-2017 рр., номер держреєстрації 0112U007761) і за темою "Сильні кореляції і конкуренції взаємодій у класичних і квантових ґраткових системах різної вимірності" (2018-2022 рр., номер держреєстрації 0118U003010), а також в межах гранту НАН України дослідницьким групам молодих вчених (2018-2019 рр., номер контракту 17/2018).

Мета і задача дослідження. Метою дослідження є вивчення низькотемпературних властивостей парамагнетика Тасакі-Габарда, побудова фазових діаграм в основному стані і розроблення теорії низькотемпературних властивостей квантових антиферромагнетиків Гайзенберга на двошарових ґратках із бездисперсійною однамагнетонною зоною в магнітних полях. У роботі були поставлені наступні задачі:

- вивчити властивості парамагнетика Тасакі-Габарда; порівняти їх із звичайним парамагнетиком Кюрі;
- варіаційним методом проаналізувати фазові діаграми основного стану спин-1/2 антиферромагнітної моделі Гайзенберга на двошарових ґратках;
- розробити ефективний опис низькотемпературних властивостей спин-1/2 фрустрованої антиферромагнітної моделі Гайзенберга на квадратній двошаровій ґратці для пояснення експериментів над сполукою $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$; побудувати фазову діаграму "магнітне поле – температура"; запропонувати нові експерименти для виявлення фазового переходу Ізинга-Онзагера;
- вивчити низькотемпературні властивості спин-1/2 антиферромагнітної моделі Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі; побудувати ефективний опис низькотемпературних властивостей вихідної моделі у полях поблизу поля насичення; отримати фазову діаграму "магнітне поле – температура";
- дослідити низькотемпературні термодинамічні властивості квантової моделі Гайзенберга на фрустрованій трикутній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі; проаналізувати вплив знаку міждимерних взаємодій на власти-

вості моделі; побудувати фазові діаграми "магнітне поле – температура"; виявити зв'язок між вихідною моделлю і моделлю жорстких шестикутників Бекстера та моделлю ґраткового газу зі скінченим відштовхуванням на трикутній ґратці.

Об'єктом дослідження є ланцюжок Тасакі-Габарда та спін-1/2 антиферромагнітна модель Гайзенберга на декількох фрустрованих двошарових ґратках (шестикутна, квадратна та трикутна).

Предметом дослідження даної роботи є низькотемпературні властивості ланцюжка Тасакі-Габарда, фазові діаграми основного стану за відсутності магнітного поля та низькотемпературна термодинаміка за наявності магнітного поля фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга.

Методи дослідження. В роботі застосовуються як аналітичні методи (такі як варіаційний підхід та операторна теорія збурень), так і числові методи (такі як точна діагоналізація та симуляції методом класичного і квантового Монте Карло).

Наукова новизна одержаних результатів. В дисертаційній роботі вперше досліджено властивості парамагнетика Тасакі-Габарда. Виявлено особливості, якими він різниться від парамагнетика Кюрі. А саме, залишкову ентропію, додатковий низькотемпературний пік у температурному профілі теплоємності, швидший перебіг процесу намагнічення у зовнішньому магнітному полі.

Простим варіаційним методом отримано фазові діаграми основного стану для квантової антиферромагнітної моделі Гайзенберга на двошарових ґратках (квадратна, шестикутна) за відсутності магнітного поля, точність яких може конкурувати з результатами одержаними за допомогою складніших методів.

Вперше побудовано ефективні моделі для опису фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга на двошарових ґратках (квадратна, шестикутна, трикутна) у режимі сильних магнітних полів і низьких температур. На основі простіших ефективних моделей вивчено властивості вихідних фрустрованих квантових спінових моделей. Зокрема, побудовано фазові діаграми в координатах "магнітне поле – температура". Виявлено різноманіття фазових переходів,

які належать до різних класів універсальності.

Пояснено експериментальні дані, отримані для сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Запропоновано провести нові низькотемпературні вимірювання теплоємності для експериментального виявлення фазового переходу Ізинга-Онзагера.

Практичне значення одержаних результатів. Запропонований підхід ефективного опису можна використати для пояснення проведених експериментів і пропозиції нових експериментів над сполукою $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у зовнішньому магнітному полі, в якій реалізується квантова спінова модель Гайзенберга на фрустрованій квадратній двошаровій ґратці. Можливе застосування одержаних результатів і до магнітної сполуки $\text{Vi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$, у якій реалізується $s = 3/2$ спінова модель Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці. Результати, отримані для трикутної двошарової ґратки, матимуть застосування до нових синтезованих сполук із такою ж структурою. Аналітичні та числові результати у дисертації для фрустрованих квантових спінових систем слугуватимуть для порівняння при дослідженні іншими методами, наприклад, з допомогою новітніх алгоритмів симуляцій квантового Монте Карло, в яких відсутня проблема знаку в області повної фрустрації. Окремі фрагменти дисертаційної роботи можуть бути використані у лекціях з теорії конденсованої матерії для магістрів і аспірантів.

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи доктор фізико-математичних наук О. В. Держко. В публікаціях [20–25] автору дисертації належить:

- аналіз властивостей парамагнетика Тасакі-Габарда в нехтовно малому магнітному полі [20];
- варіаційний аналіз і порівняння з недавніми дослідженнями фазових діаграм основного стану для квадратної та шестикутної двошарових ґраток [24];
- отримання одномагнетонного спектру для шестикутної та трикутної двошарових ґраток [21, 25];
- аналіз просторових конфігурацій жорстких об'єктів на допоміжних ґратках та побудова багатемагнетонних станів [21, 25];
- аналітичне виведення ефективних гамільтоніанів із допомогою оператор-

ної теорії збурень у випадку квадратної, шестикутної та трикутної двошарових ґраток [21, 23, 25];

– числовий аналіз ефективних моделей методами точної діагоналізації, квантового і класичного Монте Карло для систем невеликих розмірів [21–23, 25];

– отримання фазових діаграм, які відображають переходи лад-безлад, для квадратної, шестикутної та трикутної двошарових ґраток [21, 23, 25].

Обговорення та інтерпретацію отриманих результатів у статтях [20–25] співавтори виконували разом.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертації представлялись на таких конференціях: XVI, XVII та XVIII Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2016, 2017 та 2018 pp.); International Conference on Strongly Correlated Electron Systems (Prague, 2017); IX Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics" (Kyiv, 2018), а також на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Публікації. За результатами дисертації опубліковано 10 наукових праць, з них 5 статей [20–23, 25] у фахових наукових журналах, 1 препринт Інституту фізики конденсованих систем [24], 4 тези наукових конференцій [26–29].

Структура та об'єм дисертації. Дисертація складається зі вступу, розділу з оглядом літератури та чотирьох основних розділів, у яких викладені результати досліджень дисертанта, а також висновків, списку використаних джерел та двох додатків. Робота викладена на 132 сторінках (разом із літературою та додатками – 147 сторінок), бібліографічний список містить 120 найменувань публікацій у вітчизняних та закордонних виданнях.

У вступі обґрунтовано актуальність дослідження, сформульовано мету роботи, визначено наукову новизну й практичну цінність отриманих результатів та наведено стислу характеристику дисертації.

В першому розділі проведено огляд літератури, що стосується даної роботи. Обговорено фрустрацію взаємодій, умови появи бездисперсійних зон та до чого приводить наявність локалізованих одночастинкових станів у системах із сильни-

ми кореляціями. Проведено аналіз праць, в яких досліджувалися двошарові ґратки як із теоретичної точки зору, так і з точки зору експериментів (реальні магнітні сполуки). Як приклад, досліджено властивості парамагнетика Тасакі-Габарда в нехтовно малому магнітному полі. Оригінальні результати опубліковано в працях [20, 26]. Сформульовано задачі, які будуть розв'язані в даній дисертаційній роботі.

У другому розділі використано варіаційний підхід для дослідження основного стану антиферромагнетика Гайзенберга на двошарових ґратках за відсутності магнітного поля. Побудовано фазові діаграми в термінах параметрів ґраток. Проведено порівняння з результатами одержаними в недавніх роботах іншими авторами. Результати цього розділу опубліковано в працях [24, 28, 29]

В третьому розділі на основі операторної теорії збурень розроблено ефективний опис низькотемпературних властивостей для сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ в зовнішньому магнітному полі. Пояснено дані отримані з експериментів над $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ в магнітному полі. Побудовано фазову діаграму "магнітне поле – температура" в залежності від напряду поля. Запропоновано нові експериментальні вимірювання теплоємності для виявлення фазового переходу. Результати цього розділу опубліковано в праці [23].

У четвертому розділі розглянуто антиферромагнітну модель Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці й використано підхід локалізованих магнонів, щоб описати низькотемпературні властивості моделі в сильних магнітних полях. За допомогою операторної теорії збурень збудовано ефективну модель. На основі ефективної моделі, побудовано фазову діаграму "магнітне поле – температура", яка відображає переходи лад-безлад. Обговорено можливість застосування такої моделі до магнітної сполуки $\text{Vi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Результати цього розділу опубліковано в працях [21, 22, 27].

В п'ятому розділі розглянуто антиферромагнітну модель Гайзенберга на фрустрованій трикутній двошаровій ґратці в двох випадках: антиферромагнітних міждиммерних взаємодій і ферромагнітних міждиммерних взаємодій. Для дослідження низькотемпературних термодинамічних властивостей системи в магнітному

полі застосовано підхід локалізованих магнонів. Вивчено вплив типу міждимерних взаємодій на властивості моделі. Використовуючи операторну теорію збурень, збудовано ефективний гамільтоніан. Побудовано фазові діаграми "магнітне поле – температура" в залежності від знаку міждимерних обмінних взаємодій. Показано зв'язок між вихідною моделлю чи моделлю ґраткового газу зі скінченним відштовхуванням та моделлю жорстких шестикутників Бекстера на трикутній ґратці. Результати цього розділу опубліковано в праці [25].

Дисертаційна робота завершується **Висновками**, **Списком використаних джерел** та **Додатками**.

РОЗДІЛ 1

ПЛОСКІ ЗОНИ, ЛОКАЛІЗОВАНІ СТАНИ, СИЛЬНІ КОРЕЛЯЦІЇ. ДВОЛАНЦЮГИ Й ДВОШАРИ

1.1. Геометричні фрустрації та бездисперсійні (плоскі) зони

Квантова модель Гайзенберга та модель Габарда з відштовхуванням на низці ґраток (таких як пилкоподібний ланцюжок, ґратки пірохлору та кагоме, а також двошарові ґратки) можуть мати повністю бездисперсійну (плоску) зону в одно-частинковому енергетичному спектрі. Плоскозонні стани можна розглядати як повністю локалізовані в деякому скінченному об'ємі ґратки (пастці). Такі стани дозволяють побудувати багаточастинкові стани, заповнюючи ці пастки частинками (магнонами чи електронами). Якщо плоска зона стає зоною з найнижчою енергією, то множина таких багаточастинкових станів може визначати основний стан системи та її низькотемпературну фізику, навіть у присутності сильних взаємодій. Локалізована природа багаточастинкових станів робить можливим відображення цієї підмножини власних станів моделі на допоміжні просторові конфігурації відповідної класичної моделі жорстких об'єктів. Таким чином, властивості основного стану та низькотемпературні властивості сильно скорельованих систем із плоскою зоною можуть бути детально проаналізовані за допомогою концепцій та інструментів класичної статистичної механіки. Це є набагато простішим за використання стандартних технік, призначених для вивчення квантових багаточастинкових систем.

У теорії магнетизму, пов'язаного з наявністю фрустрації [30–33], системи

з локалізованими магнонами представляють особливий клас моделей, які в спеціальному режимі (сильні поля та низькі температури) дозволяють детальніше вивчення їхніх властивостей, що базується на знанні багаточастинкових станів локалізованих магнонів. У широкій області теорії моделі Габарда [34–37] і, зокрема, в теорії феромагнетизму цієї моделі [38–40], плоскостонний феромагнетизм Мільке-Тасакі забезпечує своєрідний ключ до феромагнетизму, який допускає строгий математичний аналіз. Обидві області є деякою мірою пов’язані між собою. З математичної точки зору, опис спінових та електронних систем має багато подібностей, так як основна властивість обидвох плоскостонних систем полягає в тому, що квантові багаточастинкові ступені вільності можуть бути відображені на класичні ступені вільності.

1.2. Одновимірна модель Тасакі-Габарда у парамагнітній границі

1.2.1. Механізм Мільке-Тасакі

У 1992 році Г. Тасакі розглянув стандартну (з відштовхуванням) одноорбітальну модель Габарда з гамільтоніаном

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} H_{0,\sigma} + H_U, \\
 H_{0,\sigma} &= \sum_{(ij)} t_{ij} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right), \quad t_{ij} > 0, \\
 H_U &= U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad U > 0,
 \end{aligned} \tag{1.1}$$

на певним чином декорованих ґратках, які мають бездисперсійну (плоску) одноелектронну зону з найнижчою енергією [10]. В одновимірному випадку введена таким чином ґратка також відома як пилкоподібний ланцюжок або Δ -ланцюжок із спеціальним співвідношенням між інтегралами перестрибування вздовж прямої лінії t_1 і вздовж зигзаг шляху t_2 : $t_2 = \sqrt{2}t_1 > 0$ (див. рис. 1.1). Добре відомо [10], що основним станом цієї моделі є повністю поляризований (насичений)

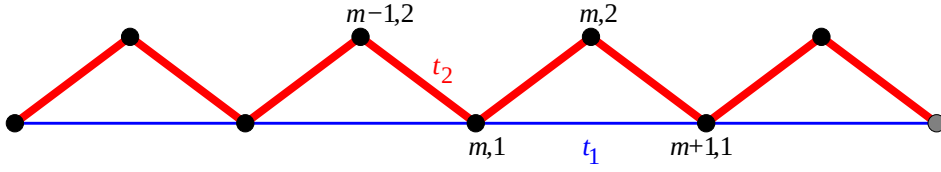


Рис. 1.1. Одновимірна ґратка Тасакі. Тут $t_2 = \sqrt{2}t_1 > 0$.

феромагнітний стан, тобто $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}} = (n/2)[(n/2) + 1]$, якщо число електронів n дорівнює $\mathcal{N} = N/2$ або $\mathcal{N} - 1$. Для менших чисел електронів, $1 < n < \mathcal{N} - 1$, маємо $0 < \langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}} < (n/2)[(n/2) + 1]$ (ненасичений феромагнетизм). Більше того, $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}} / n^2 = 0$, якщо $n/N < 1/2$. Іншими словами, термодинамічно великі системи проявляють феромагнетизм в основному стані лише для $n/N = 1/2$, але є парамагнітними для $0 < n/N < 1/2$.

Механізм Мільке-Тасакі для феромагнетизму в основному стані вивчався у [8–11, 38, 39, 41–43]. $\mathcal{N}$ станів із плоскої зони з найнижчою енергією $\varepsilon_1 = -2t_1$ можна візуалізувати як локалізовані в V-подібній частині ланцюжка (пастці), тобто, ці плоскостонні стани задаються як $l_{m,\sigma}^\dagger |0\rangle$, $l_{m,\sigma}^\dagger = c_{m-1,2,\sigma}^\dagger - \sqrt{2}c_{m,1,\sigma}^\dagger + c_{m,2,\sigma}^\dagger$, $m = 1, \dots, \mathcal{N}$ (див. рис. 1.1). Сусідні пастки мають спільні вузли (це вузли $m, 2$; $m = 1, \dots, \mathcal{N}$, див. рис. 1.1). Основні стани для $1 < n < \mathcal{N} - 1$ електронів складаються з множини незалежних кластерів, де кожен кластер сконструйований через поєднання заселених електронами пасток у симетричному спіновому стані (феромагнітний кластер). Багатоелектронні стани, побудовані таким чином не відчувають габардівського відштовхування $U > 0$ і належать водночас до множини основних станів взаємодіючої і невзаємодіючої ($U = 0$) системи з енергією $n\varepsilon_1$. Для $n = \mathcal{N}$ і $n = \mathcal{N} - 1$ не існує ізольованих кластерів, тобто, можна сконструювати лише єдиний феромагнітний кластер. Тому основний стан є феромагнітним із максимальним значенням $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}}$. Для менших $1 < n < \mathcal{N} - 1$ можуть з'являтися ізольовані одне від одного кластери, і $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}}$ є меншим ніж його максимальне значення $\mathbf{S}_{\max}^2 = (n/2)[(n/2) + 1]$. Також можна розрахувати число основних станів, тобто, кратність виродження основного стану [8, 44, 45]. Відображаючи основні стани $n < \mathcal{N}$ електронів N -вузлового ланцюжка Тасакі на просторові конфігурації n жорстких димерів на $2\mathcal{N}$ -вузловому простому ланцюжку [44], можна знайти

кратність виродження основного стану $g_{\mathcal{N}}(n)$:

$$g_{\mathcal{N}}(n) = \frac{2\mathcal{N}}{2\mathcal{N} - n} C_{2\mathcal{N}-n}^n. \quad (1.2)$$

Зважаючи на те, що канонічна статистична сума n електронів на ланцюжку Тасаки з об'ємом $\mathcal{N} = N/2$ комірок є $Z(T, n, \mathcal{N}) = g_{\mathcal{N}}(n)e^{-n\varepsilon_1/T}$, зразу ж можна одержати з рівняння (1.2) вільну енергію Гельмгольца $F(T, n, \mathcal{N}) = -T \ln Z(T, n, \mathcal{N})$,

$$F(T, n, \mathcal{N}) = -\mathcal{N}T \ln \frac{(2-p)^{2-p}}{p^p(2-2p)^{2-2p}} + n\varepsilon_1, \quad (1.3)$$

де $p = n/\mathcal{N}$ визначає густину електронів. Також можна розрахувати і велику канонічну статистичну суму [44, 45]

$$\Xi(T, \mu, \mathcal{N}) = \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + e^{\frac{\mu - \varepsilon_1}{T}}} \right)^{2\mathcal{N}} \quad (1.4)$$

і великий термодинамічний потенціал

$$\Omega(T, \mu, \mathcal{N}) = -2\mathcal{N}T \ln \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + e^{\frac{\mu - \varepsilon_1}{T}}} \right). \quad (1.5)$$

Термодинамічні функції в рівнянні (1.3) і рівнянні (1.5) пов'язані перетворенням Лежандра $F = \Omega + \mu n$ після виключення μ у правій частині цього рівняння, використовуючи співвідношення $n = -\partial\Omega/\partial\mu$. Формули (1.3) чи (1.5) дозволяють обчислити вклад множини сильно вироджених основних станів до термодинаміки розглянутої моделі Габарда. Цей вклад домінує для $0 \leq p \leq 1$ або для $\mu \approx \varepsilon_1$ у низькотемпературному режимі [8, 44, 45].

1.2.2. Наявність нехтовно малого магнітного поля

Розгляньмо випадок присутності нехтовно малого зовнішнього магнітного поля $h > 0$, тобто, поле є ненульовим, але воно представляє найменший енергетичний масштаб у цій задачі. Вивчення такої проблеми розширює попередні дослідження [44, 45]. Нас цікавить випадок $1 \leq n < \mathcal{N} - 1$, в якому проявляється парамагнетизм у термодинамічній границі $n \rightarrow \infty$, $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, $0 < p = n/\mathcal{N} < 1$.

Метою є вивчення особливостей одновимірного парамагнетика Тасаки-Габарда в порівнянні зі звичайним спин-1/2 парамагнетиком Кюрі. Ці особливості виникають: через виродження множини основних станів, і через більші розміри індивідуальних магнітних моментів (які пропорційні до розміру ізольованих феромагнітних кластерів) і через розподіл розмірів феромагнітних кластерів. Для повноти, приведемо тут вільну енергію для спин-1/2 парамагнетика Кюрі

$$f_C(T, h) = -T \ln \frac{\sinh \frac{h}{T}}{\sinh \frac{h}{2T}} = -T \ln \left(2 \cosh \frac{h}{2T} \right). \quad (1.6)$$

Ми розглядаємо скінченні ланцюжки, які складаються з $N = 12, 16, 20, 24$ вузлів. Надалі для ланцюжків скінченних розмірів із $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ пастками використовується канонічний опис. Варто зауважити, що в попередніх дослідженнях [8, 44, 45] моделі (1.1) використовувався підхід великого канонічного ансамблю. В присутності магнітного поля формула для $Z(T, n, \mathcal{N})$ має бути модифікована. Розглянемо, наприклад, випадок $n = 4$ і $\mathcal{N} = 6$. Відповідно до рівняння (1.2) для $h = 0$ ми одержуємо $g_6(4) = 105$, і тому $Z(T, 4, 6) = 105e^{-4\varepsilon_1/T}$. Кратність виродження основного стану 105 походить від 6 просторових однокластерних конфігурацій (кожна просторова конфігурація має виродження 5), 6 просторових конфігурацій "3-вузловий кластер + 1-вузловий кластер" (кожна просторова конфігурація має виродження 8) і 3 просторових конфігурацій "2-вузловий кластер + 2-вузловий кластер" (кожна просторова конфігурація має виродження 9). Якщо $h > 0$, згадані стани мають різну енергію, що приводить до нової формули для $Z(T, h, 4, 6)$:

$$\begin{aligned} Z(T, h, 4, 6) = & e^{-\frac{4\varepsilon_1}{T}} \\ & \times \left[6 \left(e^{\frac{2h}{T}} + e^{\frac{h}{T}} + 1 + e^{-\frac{h}{T}} + e^{-\frac{2h}{T}} \right) \right. \\ & + 6 \left(e^{\frac{3h}{2T}} + e^{\frac{h}{2T}} + e^{-\frac{h}{2T}} + e^{-\frac{3h}{2T}} \right) \left(e^{\frac{h}{2T}} + e^{-\frac{h}{2T}} \right) \\ & \left. + 3 \left(e^{\frac{h}{T}} + 1 + e^{-\frac{h}{T}} \right)^2 \right]. \end{aligned} \quad (1.7)$$

Розрахунок вільної енергії Гельмгольца на один електрон $f_{\text{TH}}(T, h, p) = -T \ln Z(T, h, n, \mathcal{N})/n$ та інших термодинамічних величин тепер є простим і може

бути зроблений за допомогою програмного забезпечення для аналітичних обчислень.

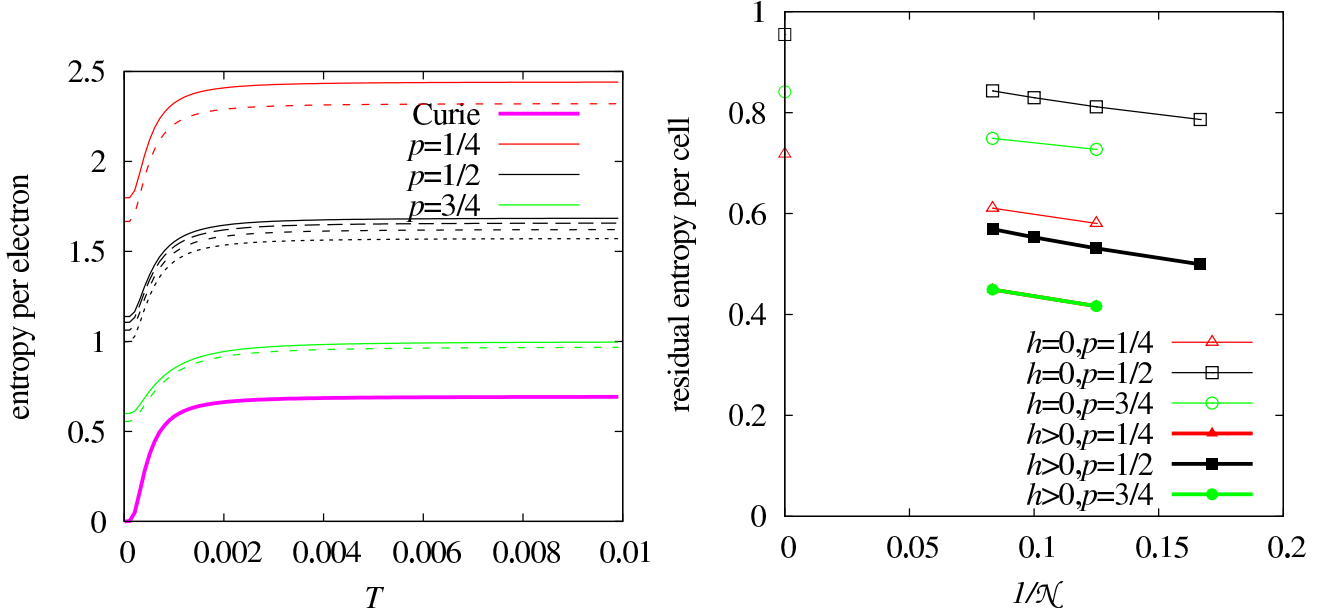


Рис. 1.2. Ліва панель: температурна залежність ентропії на один електрон $s(T, h, p)$ для $h = 0.001$ та $p = 1/4$ (червоний), $p = 1/2$ (чорний) і $p = 3/4$ (зелений). Результати для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ комірок представлені пунктирною, штриховою, довгоштриховою та суцільною кривими відповідно. Товста пурпурна крива відповідає парамагнетизму Кюрі. Права панель: залежність залишкової ентропії на одну комірку $S(T = 0, h, n, \mathcal{N})/\mathcal{N}$ від $1/\mathcal{N}$ для $h = 0$ (тонкі криві) та $h > 0$ (товсті криві) для концентрацій електронів $p = 1/4$ (червоний), $p = 1/2$ (чорний) і $p = 3/4$ (зелений). Зауважимо, що товста червона та зелена криві збігаються. Результати в термодинамічній границі для $h = 0$ представлені символами на осі ординат.

Результати представлені на рисунках 1.2 – 1.6. Температурні залежності ентропії та теплоємності представлені на рисунках 1.2 і 1.3 відповідно. Для нульового поля, $h = 0$, ми знаємо [8, 44, 45], що сильне виродження основного стану веде до наявності ненульової залишкової ентропії, тобто, $S(T, h = 0, n, \mathcal{N})/n = [\ln g_{\mathcal{N}}(n)]/n \neq 0$, так само як і до обертання в нуль теплоємності, тобто, $C(T, h = 0, n, \mathcal{N}) = 0$. Включення поля h частково знімає виродження множини основних станів, проте, кратність виродження все одно залишається експоненційно великою, так що ненульова залишкова ентропія (хоча і зменшена) залишається (див. рис. 1.2). Для парамагнетика Кюрі: основний стан при $h > 0$ —

це єдиний феромагнітний стан, тобто, залишкова ентропія відсутня. Скінченнорозмірна залежність на правій панелі рисунка 1.2 дає підтвердження, що залишкова ентропія присутня і для $N \rightarrow \infty$.

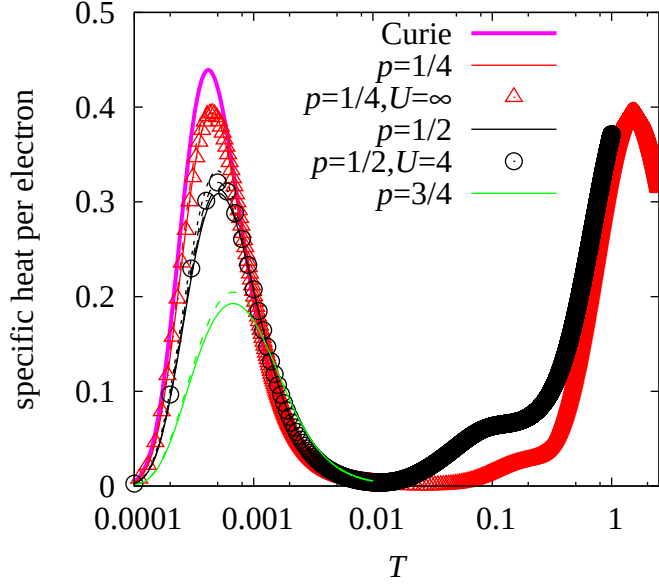


Рис. 1.3. Температурна залежність теплоємності на один електрон $c(T, h, p)$ для $h = 0.001$ та $p = 1/4$ (червоний), $p = 1/2$ (чорний) і $p = 3/4$ (зелений). Результати для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ комірок представлені пунктирною, штриховою, довгоштриховою та суцільною кривими відповідно. Товста пурпурна крива відповідає парамагнетика Кюрі. Символами показано дані точної діагоналізації для моделі Габарда (1.1) з $U = 4$, $N = 16$, $n = 4$ (кружечки) та $U \rightarrow \infty$, $N = 24$, $n = 3$ (трикутники).

Теплоємність при ненульовому полі h показує вже нетривіальну залежність від температури й узгоджується з даними точної діагоналізації для моделі (1.1) при низьких температурах (див. рис. 1.3). Окрім того, ефекти скінченних розмірів малі (результати для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ майже збігаються). Як тільки величина p зростає, відхилення від випадку парамагнетика Кюрі стає виразнішим (пік стає нижчим і ширшим) і низькотемпературна частина $C(T, h, n, \mathcal{N}) \rightarrow 0$, коли $p \rightarrow 1$.

Низькотемпературні криві намагніченості на рисунку 1.4 показують, що легше намагнічувати парамагнетик Тасакі-Габарда з $p > 0$, ніж парамагнетик Кюрі, тобто, парамагнетик Тасакі-Габарда має властивості суперпарамагнетика. Це узгоджується з результатами для початкової (за нульового поля) магнітної сприйнятливості, показаної на рисунку 1.5.

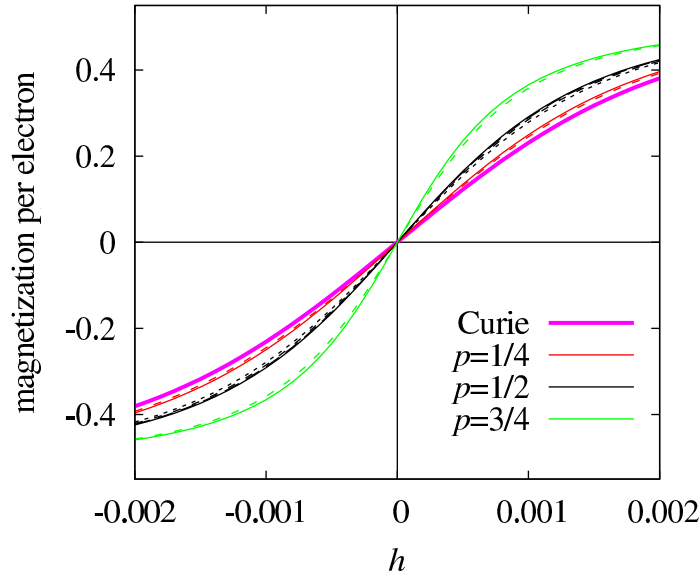


Рис. 1.4. Залежність від поля намагніченості на один електрон $m(T, h, p)$ для $T = 0.001$ та $p = 1/4$ (червоний), $p = 1/2$ (чорний) і $p = 3/4$ (зелений). Результати для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ комірок представлені пунктирною, штриховою, довгоштриховою та суцільною кривими відповідно. Товста пурпурна крива відповідає парамагнетику Кюрі.

Нарешті, обговоримо магнітні властивості парамагнетика Тасакі-Габарда в основному стані при $h = 0$. Розрахуємо усереднений квадрат повного спіну $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}}$ [45, 46]. Прямий спосіб одержати $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}}$ — використати його означення. Для розглянутого прикладу $n = 4$, $\mathcal{N} = 6$, в 30 станах $\mathbf{S}^2$ має значення 6, у 48 станах $\mathbf{S}^2$ має значення $9/2$ і в 27 станах $\mathbf{S}^2$ має значення 4. Тому $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{4,6} = 24/5$. Інший спосіб одержати $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}}$ полягає в тому, щоб порахувати спочатку (нормоване) число кластерів із l електронами, $n(l)$, а потім просумувати $\sum_{l=1}^n n(l)(l/2)[(l/2) + 1]$ [46]. Для розглянутого прикладу, $n(1) = 48/105$, $n(2) = 54/105$, $n(3) = 48/105$ і $n(4) = 30/105$ приводить знову до $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{4,6} = 24/5$. Останій підхід є зручним при використанні картини перколяції, так як розподіл кластерів за розмірами $n(l)$ можна отримати або аналітично, або числовим способом. Таким чином було знайдено результат у термодинамічній границі для одновимірного випадку [46]:

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}} / \mathcal{N} = 3p(2 - p) / [8(1 - p)]. \quad (1.8)$$

Третя можливість одержати $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}}$ полягає у використанні закону Кюрі для тем-

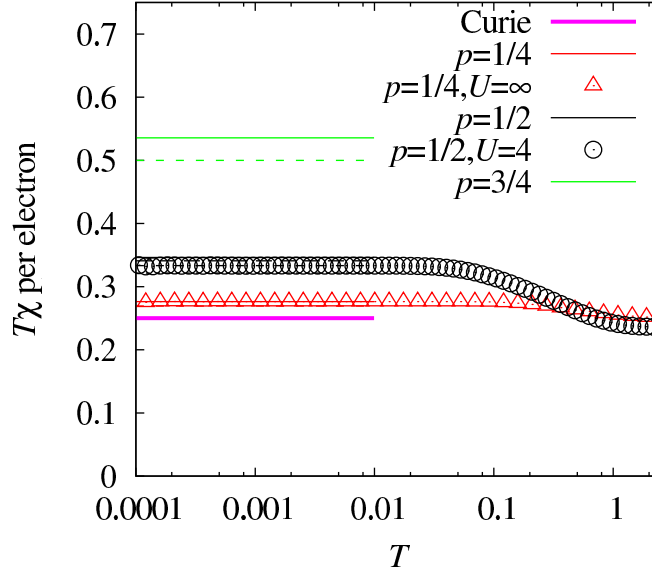


Рис. 1.5. Температурна залежність магнітної сприйнятливості на один електрон $\chi(T, h, p)$ помножена на T для $h = 0$ та $p = 1/4$ (червоний), $p = 1/2$ (чорний) і $p = 3/4$ (зелений). Результати для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ комірок представлені пунктирною, штриховою, довгоштриховою та суцільною кривими відповідно. Товста пурпурна крива відповідає парамагнетизму Кюрі. Символами показано дані точної діагоналізації для моделі Габарда (1.1) з $U = 4$, $N = 16$, $n = 4$ (кружечки) та $U \rightarrow \infty$, $N = 24$, $n = 3$ (трикутники).

пературної залежності початкової магнітної сприйнятливості $\chi(T, h = 0) = C/T$, так як для сталої Кюрі маємо співвідношення $C = \langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}} / 3$. Застосувавши останній підхід, приходимо до

$$\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}} = 3T^2 \left. \frac{\partial^2 \ln Z(T, h, n, \mathcal{N})}{\partial h^2} \right|_{h=0}. \quad (1.9)$$

У таблиці 1.1 зібрано результати для $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}}$, $n = 1, \dots, \mathcal{N} - 1$, які збігаються з результатами для $\mathcal{N} = 6, 8$, представленими в [45]. На рисунку 1.6 показано результати для $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}}$, отримані з рівняння (1.9), які демонструють, що: феромагнетизм зникає для $0 < p < 1$, коли $\mathcal{N}$ зростає (головна панель) і $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n, \mathcal{N}} / \mathcal{N}$ прямує до $3p(2-p)/[8(1-p)]$ (товста чорна крива) [46], коли $\mathcal{N}$ зростає (вставка).

Підводячи підсумки, зазначимо, що приведені тут дослідження розширює аналіз із [44, 45] для ланцюжка Тасакі-Габарда: тепер ми вводимо нехтовно мале зовнішнє магнітне поле і показуємо як змінюються попередні результати. При ма-

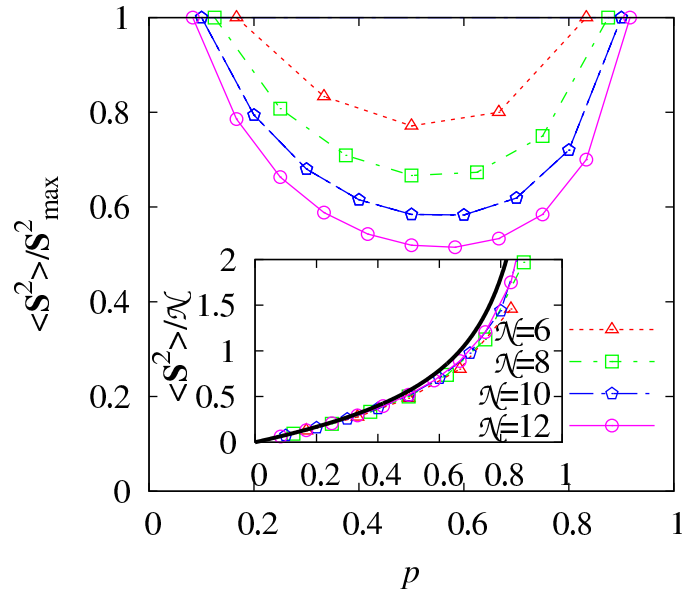


Рис. 1.6. Головна панель: залежність усередненого (за основними станами) квадрата повного спіну $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}}$ (пронормованого на його максимальне значення $(n/2)(n/2 + 1)$) від густини електронів p . Результати для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ комірок представлені пунктирною, штриховою, довгоштриховою та суцільною кривими відповідно. Вставка: залежність усередненого (за основними станами) квадрата повного спіну $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}}$ (на комірку) від густини електронів p . Товста чорна крива відповідає результату при $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, отриманому в [46].

Табл. 1.1. Значення $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,\mathcal{N}}$ для ланцюжків Тасакі з різним числом електронів і комірок, як впливає з рівняння (1.9).

n	1	2	3	4	5	6	7	8	9	10	11
$\mathcal{N} = 6$	$\frac{3}{4}$	$\frac{5}{3}$	$\frac{81}{28}$	$\frac{24}{5}$	$\frac{35}{4}$						
$\mathcal{N} = 8$	$\frac{3}{4}$	$\frac{21}{13}$	$\frac{117}{44}$	4	$\frac{165}{28}$	9	$\frac{63}{4}$				
$\mathcal{N} = 10$	$\frac{3}{4}$	$\frac{27}{17}$	$\frac{51}{20}$	$\frac{48}{13}$	$\frac{225}{44}$	7	$\frac{39}{4}$	$\frac{72}{5}$	$\frac{99}{4}$		
$\mathcal{N} = 12$	$\frac{3}{4}$	$\frac{11}{7}$	$\frac{189}{76}$	$\frac{60}{17}$	$\frac{19}{4}$	$\frac{81}{13}$	$\frac{357}{44}$	$\frac{32}{3}$	$\frac{405}{28}$	21	$\frac{143}{4}$

лих густинах електронів система є парамагнетиком. Проте, вона є відмінною від звичайного парамагнетика Кюрі і швидше нагадує суперпарамагнетик із сильною виродженістю основного стану й розподілом (дисперсією) за розміром феромагнітних кластерів. Порівняння з даними точної діагоналізації показують, що розроблений підхід застосовний для опису низькотемпературних властивостей парамагнітного ланцюжка Тасакі-Габарда. Розрахунок $Z(T, h, n, \mathcal{N})$ можна продовжити і для більших $\mathcal{N}$, а от обчислення за допомогою точної діагоналізації для $n = 6$

($n = 5$) електронів і $\mathcal{N} = 8$ ($\mathcal{N} = 12$) комірок, якщо U скінченне (якщо $U \rightarrow \infty$) є на сьогодні межею.

1.3. Ґратки типу двошар

У дисертаційній роботі основним об'єктом дослідження є квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на двошарових ґратках. Розглянемо детальніше, що відомо в літературі про такі двошарові системи.

1.3.1. Експеримент

Моделі на двошарових ґратках не обмежуються тільки теоретичними дослідженнями. Такі системи постійно синтезуються і вивчаються експериментально [19, 47–58].

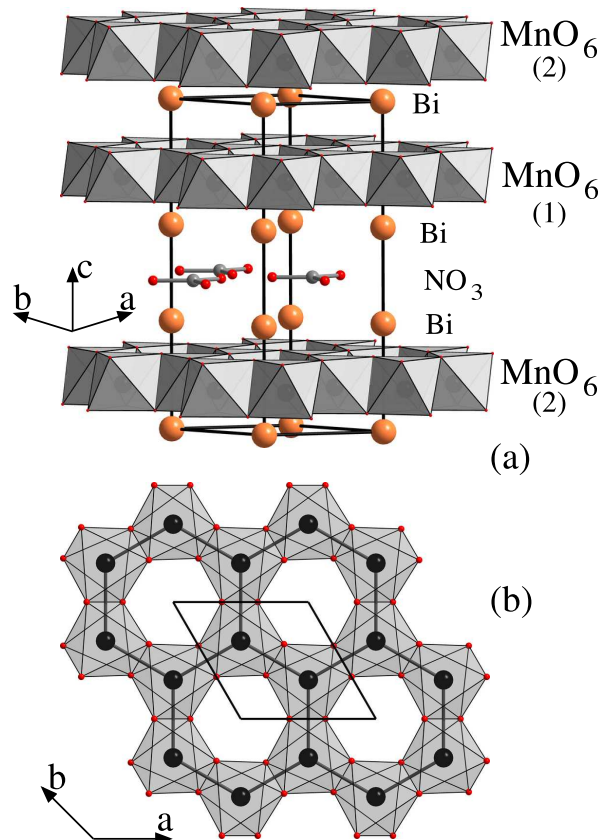


Рис. 1.7. Структура двошарової сполуки $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Рисунок узятो з [50].

Почнімо зі сполуки $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ (вісмут-марганець оксинітрат) [47].

Про синтез сполуки було повідомлено в 2009 році в [47]. Також у цій же ж роботі було проведено аналіз такого оксинітрату за допомогою нейтронної дифракції. Окремі шари сполуки утворені деформованими октаедрами MnO_6 , які мають спільні грані з атомами кисню у вершинах (див. рис. 1.7). Кожен шар — це шестикутна ґратка, утворена іонами Mn^{4+} зі спіном $s = 3/2$. Експериментальні вимірювання дозволили отримати температурні залежності магнітної сприйнятливості та теплоємності. Незважаючи на досить велику константу Вейса -253 К, не було виявлено дальнього антиферромагнітного порядку аж до температури 0.4 К. Така поведінка пояснюється антиферромагнітною взаємодією наступних найближчих сусідів у кожному шарі, яка створює магнітну фрустрацію.

Сполука $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ вивчалася також і за допомогою високопольового електронного спінового резонансу [48] та розсіювання нейтронів [49]. Вимірювання за допомогою високопольового електронного спінового резонансу виконувалися з використанням імпульсного магнітного поля до 16 Т. Аналіз температурних залежностей не виявив жодних резонансних зсувів та безщільної поведінки. Знову, не було знайдено ніяких доказів існування дальнього впорядкування до температури 1.9 К. В роботі [49] експерименти з розсіюванням нейтронів підтвердили, що за відсутності магнітного поля далекий магнітний порядок відсутній до температури 3 К. Це вказує на те, що основному стані відсутній далекий магнітний порядок. Проте, при низьких температурах виникає близький антиферромагнітний порядок, який за своєю природою нагадує скло. Також було зауважено, що взаємодія між двома ґратками-шарами, що формує двошарову структуру, аж ніяк не є нехтовно малою.

У роботі [50] було проведено розрахунок констант взаємодії для сполуки $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ з перших принципів. Розрахунки базувалися на теорії функціоналу електронної густини. Такі розрахунки показали, що взаємодії між найближчими сусідами в окремому шарі та між шарами є найважливішими. Було також отримано значення для взаємодій між другими та третіми сусідами в окремому шарі, які є набагато слабшими. Дослідження показали, що всі взаємодії є антиферромагнітними. Також розрахунки вказують на те, що взаємодія між шарами є

найсильнішою і може перевищувати взаємодію між найближчими сусідами вдвічі.

Як бачимо, дискусія щодо параметрів обмінної взаємодії триває. Досі не є відомо, які з них домінують над іншими, а це є важливо з точки зору застосування до сполуки тієї чи іншої моделі.

У 2014 році було синтезовано магнітну сполуку $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [19]. В цій роботі було визначено структуру сполуки та досліджено її магнітні властивості.

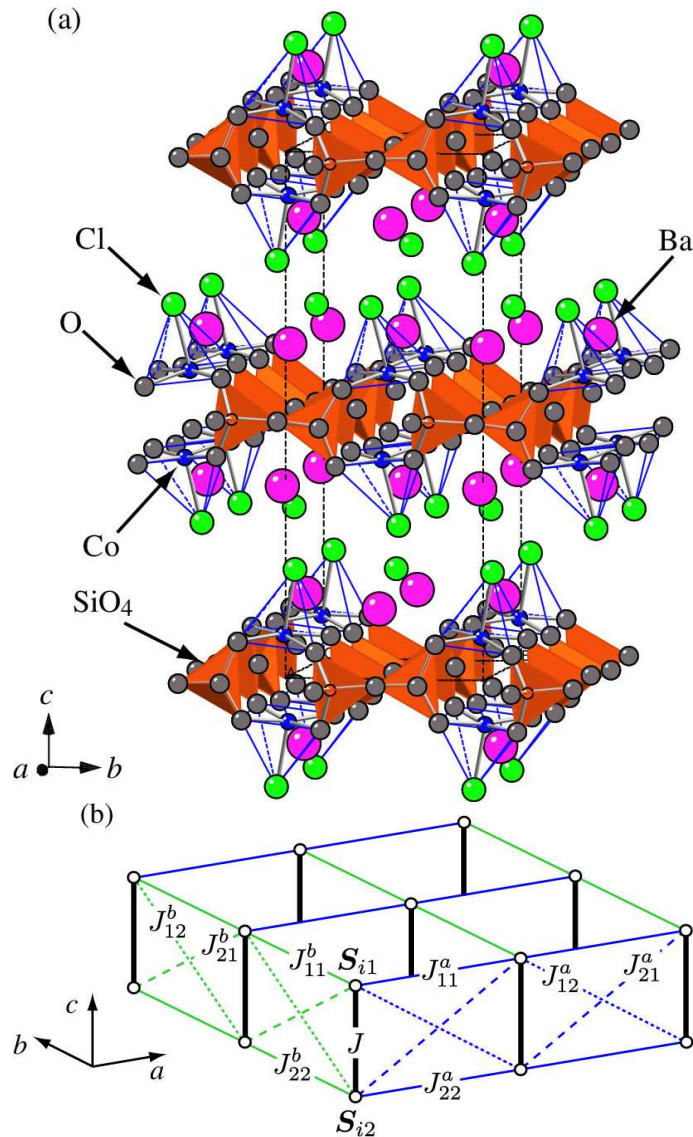


Рис. 1.8. Структура двошарової сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Рисунок узято з [19].

Кристалічна структура складається з пірамід CoO_4Cl з йонами Cl^- у вершинах. Магнітний йон Co^{2+} розташований приблизно в центрі основи складеної з O^{2-} , яка майже паралельна до ab -площини (див. рис. 1.8). Дві піраміди CoO_4Cl

утворюють хімічний димер із їхніми основами, які повернені одне до одного. Піраміди CoO_4Cl з'єднані через тетраедри SiO_4 у ab -площині.

Магнітні властивості Co^{2+} в октаедричному середовищі визначаються найнижчим орбітальним триплетом 4T_1 [59, 60]. Цей орбітальний триплет розщеплюється на шість дублетів Крамерса внаслідок спин-орбітальної взаємодії та низькосиметричного кристалічного поля. Коли температура T є набагато нижчою за величину спин-орбітальної взаємодії, магнітні властивості визначаються найнижчим дублетом Крамерса. Тоді ефективний магнітний момент Co^{2+} представляється допоміжним оператором спин-1/2 [59, 60]. Коли октаедричне середовище проявляє тетрагональну симетрію, то ефективна обмінна взаємодія між такими спінами описується спин-1/2 XXZ -моделлю [60].

Кристал $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ досліджувався у зовнішньому магнітному полі різних напрямків: як уздовж осі c так і паралельно до ab -площини. Було виявлено, що сполука проявляє сходинкоподібний процес намагнічення з плато на одній другій максимального значення намагнічення, незалежно від напрямку прикладеного магнітного поля. Це, а також відсутність структурного фазового переходу, показує, що для міждимерних обмінних взаємодій притаманна майже ідеальна фрустрація.

Експериментальне вивчення манетика $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ продовжене в статті [51]. У цій роботі представлені результати вимірювань непружного розсіювання нейтронів, які надають чіткі докази присутності майже ідеальної фрустрації міждимерних обмінних взаємодій. Вимірювання проводилися при температурах до 4 К. При цьому спостерігалися п'ять різних типів магнітних збуджень, які всі є бездисперсійними. Також було виявлено недимерні спіни, утворені випадковими дефектами йонів Co^{2+} , які спричиняють незвичайний спектр збуджень, що виникає із тричастинкової задачі. Показано, що включення таких спінів, навіть у малій кількості, робить суттєвий внесок у спектр збуджень. Таку магнітну сполуку можна вважати ідеальним кандидатом для спостереження фізики, пов'язаної з локалізованими магнонами.

Нещодавно було виявлено нового кандидата на наявність фази квантової

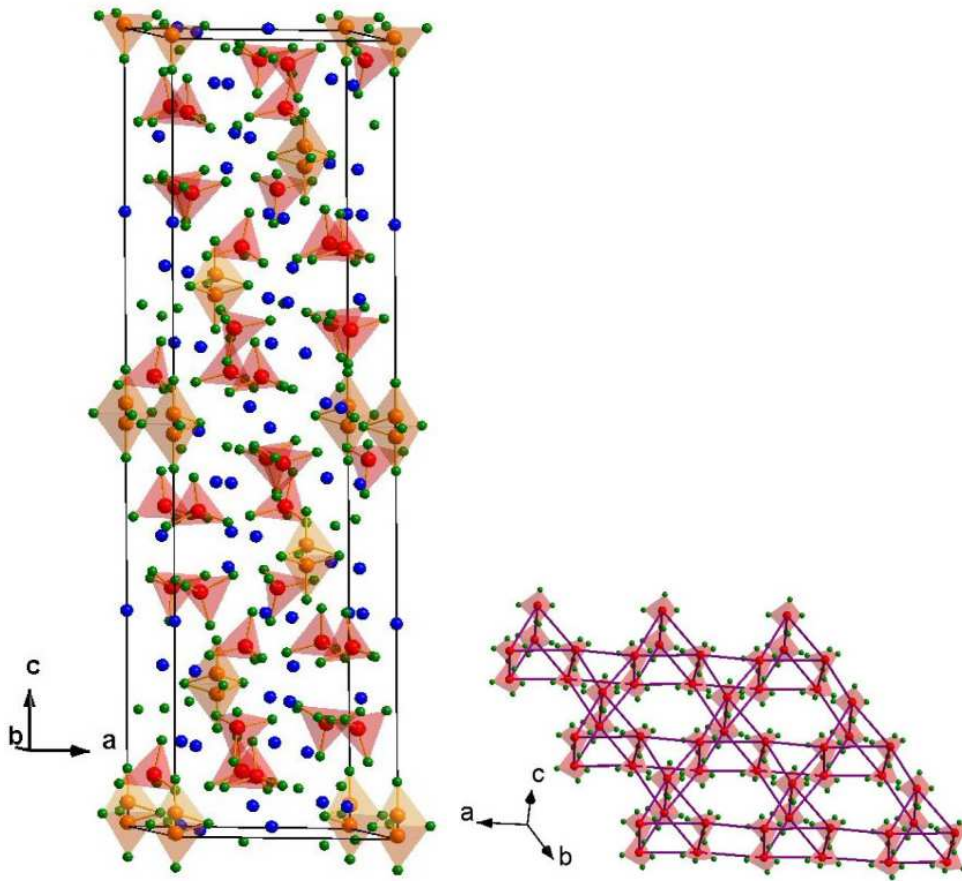


Рис. 1.9. Структура двошарової сполуки $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$. Рисунок узято з [58].

спінової рідини: сполука $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ являє собою двошар, який складається з ґраток кагOME. Пошук фази квантової спінової рідини стимулював багато досліджень цього нового матеріалу [52–57]. У сполуці є сім йонів хрому з різною валентністю; шість із них є магнітними Cr^{5+} , а сьомий — немагнітний Cr^{6+} , координується оксигеновими тетраедрами [53]; вони представлені червоним і помаранчевим кольорами відповідно (див. рис. 1.9). Магнітні йони Cr^{5+} володіють моментами спіну-1/2, формуючи два нееквівалентні деформовані шари кагOME, укладені вздовж осі c (див. рис. 1.9) [52, 53]. Ґратка кагOME побудована з трикутників із спільними кутами, що спричиняє сильну геометричну фрустрацію. Ці два шари кагOME зв'язані разом у двошар через феромагнітні взаємодії, що з'єднують феромагнітні трикутники одного шару з антиферомагнітними трикутниками в іншому шарі [52]. Феромагнітні взаємодії є домінантними серед усіх інших взаємодій, що приводить до гамільтоніана з ізотропними феромагнітними взаємодіями, що є рідкісним для

кандидата на квантову спінову рідину [52].

Автори роботи [58] провели наднизькотемпературні вимірювання теплопровідності на монокристалах $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$. В околі певної точки кривої залежності теплопровідності від магнітного поля спостерігається заглиблення при скінченних температурах, що вказує на можливий перехід (кросовер) у основному магнітному стані. Що важливіше, у границі нульових температур не виявлено залишкового лінійного члена при жодних магнітних полях, що демонструє відсутність безщільних незв'язаних збуджень із ферміонною статистикою. Ці результати дозволяють припустити, що магнітні збудження є або локалізованими, або відділені від основного стану малою щільною. Ці результати накладають сильні обмеження на основний стан і теоретичний опис сполуки.

1.3.2. Теорія

Двошарові ґратки в останні роки викликають великий інтерес серед дослідників-теоретиків, про що свідчать публікації значної кількості робіт [61–67]. Публікації стосуються як квантових [62–65, 67] так і класичних [61, 66] спінових моделей на двошарових ґратках із різною геометрією.

У роботі [61] автори досліджували класичну $S \gg 1$ антиферомагнітну модель Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці у сильно фрустрованому режимі за наявності зовнішнього магнітного поля. Модель включає сильні антиферомагнітні зв'язки між шарами, зв'язки між найближчими сусідами в окремих шарах та діагональні фрустровані зв'язки між шарами. В такій класичній системі було виявлено ряд нових фаз, викликаних зовнішнім магнітним полем, які є згенеровані температурним ефектом "лад-із-безладу". Відбір станів змінюється вздовж кривої намагніченості з плато в $M = 1/2$, що розділяє області з різною поведінкою. Основним результатом дослідження є фазова діаграма "магнітне поле – температура". Поєднання аналітичних міркувань та методу класичного Монте Карло дозволило виявити все багатство фаз у режимі низьких температур та сильної фрустрації, коли діагональні зв'язки між шарами за величиною збігаються зі

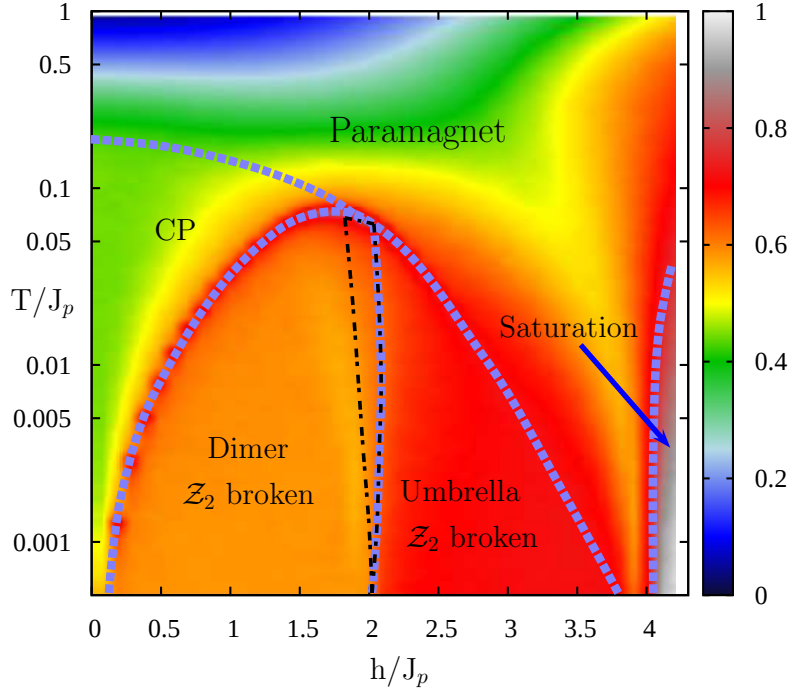


Рис. 1.10. Фазова діаграма для класичної моделі Гайзенберга на шестикутній двохаровій ґратці. Рисунок узято з [61].

зв'язками в окремих шарах між найближчими сусідами. Фазова діаграма представляє три нетривіальні області, що характеризуються порушенням ґраткових симетрій та різним ентропійним відбором "лад-із-безладу". Ці відбори частково знімають виродження основного стану для різних значень зовнішнього магнітного поля.

Підходячи з області високих температур, можна спостерігати перехід із звичайної парамагнітної фази у фазу кооперативного парамагнетика. Продовжуючи понижувати температуру, в області низьких полів $h/J_p < 2$ з'являється відбір "лад-із-безладу" в фазу з порушеною симетрією $\mathbb{Z}_2$. Обчислення кумулянта Біндера показало, що перехід між кооперативним парамагнетиком і димерною фазою є фазовим переходом другого роду, де порушується $\mathbb{Z}_2$ -симетрія.

В околі $h/J_p = 2$ не повністю колінеарне плато $1/2$ намагніченості стабілізується при низькій температурі. Цей новий вид класичного плато є в сильній суперечності до уявлення про стани повністю колінеарного класичного плато в фрустрованій ґратці, як у трикутному [68] і шестикутному [69] випадках. Ця нова властивість виникає через дуже велике конфігураційне виродження системи

фрустрованих "класичних спінових димерів". Стабілізована структура складається з чергування поляризованих і антипаралельних спінових пар у фазі плато, яка порушує $\mathbb{Z}_2$ -симетрію між двома вузлами в елементарній комірці шестикутної ґратки.

Для $h/J_p > 2$, підходячи з фази кооперативного парамагнетика, спочатку спостерігається відбір "лад-із-безладу" до фази з порушеною $\mathbb{Z}_2$ -симетрією і з порушеною конфігурацією "парасольки"; це — фазовий перехід другого роду. У границі $T \rightarrow 0$ і $h/J_p > 2$ є новий відбір "лад-із-безладу" всередині множини основних станів, де пара спінів є повністю вилаштована за магнітним полем.

Дослідження [62] присвячене вивченню фазової діаграми фрустрованої моделі Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці в основному стані при нульовій температурі, яка включає міжшарову фрустрацію. При певному значенні максимальної фрустрації отримано точно розв'язну модель із димеризованим основним станом. Дослідження було зосереджене на випадку $S = 1/2$, де квантові флюктуації стають важливішими. Проте деякі результати можуть бути використаними й для випадків із більшими значеннями спіну.

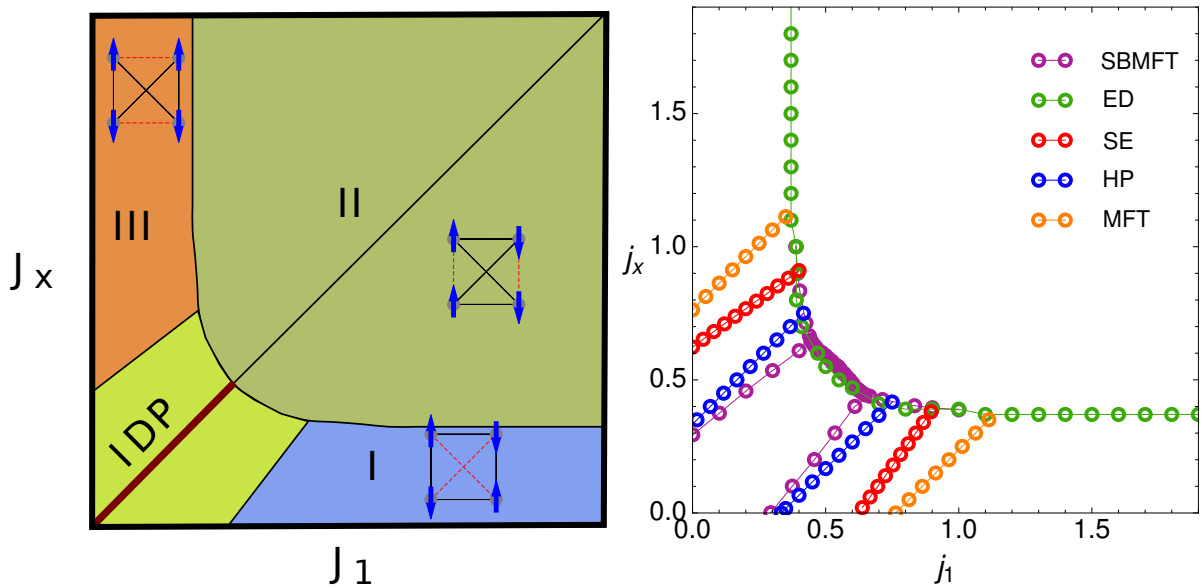


Рис. 1.11. Якісна та кількісна фазові діаграми для шестикутної двошарової ґратки в основному стані. Тут вважається, що димерні взаємодії $J_0 = 1$. Рисунок узятो з [62].

У роботі вивчаються квантові фази моделі в просторі обмінних параметрів,

які є навколо точного димерного стану. Для цього використовуються різні техніки: метод операторів на зв'язку, теорія середнього поля для бозонів Швінгера та ровинення в ряди на основі методу неперервного унітарного перетворення. Таке вивчення моделі також доповнене точною діагоналізацією Ланцоша на скінченних системах. В роботі наведено результати для енергій основного стану, спінових щілин, спінових кореляційних функцій, побудована квантова фазова діаграма (див. рис. 1.11), а також пояснена природа квантових фазових переходів.

Перш за все потрібно зауважити, що фазова діаграма є симетричною відносно лінії $J_1 = J_X$ (див. рис. 1.11). Товста темно-червона частина діагональної лінії максимальної фрустрації $J_1 = J_X$ відповідає точному димерному стану (див. рис. 1.11). Цей стан закінчується в точці фазового переходу першого роду в основний стан $S = 1$ антиферомагнітної моделі Гайзенберга на шестикутній ґратці, який поширюється вздовж неперервної чорної діагональної лінії (див. рис. 1.11). Числові результати показують, що це відбувається при $J_1 = J_X \simeq 0.5$, $J_0 = 1$.

Відходячи від лінії максимальної фрустрації, точний димерний стан переходить у міжшарову димерну фазу зі щілиною (IDP на рис. 1.11). Ця фаза є істотно квантовою і неупорядкованою; у ній знайдені дисперсійні триплонні збудження.

Для достатньо сильного J_1 і/або J_X система віддає перевагу колінеарному порядку з простим напівкласичним поясненням. Існують три можливості мінімізувати дві з трьох обмінних енергій, залишаючи одну з них фрустрованою. Відповідне спінове оточення і фази позначені I, II і III (див. рис. 1.11). Фрустрований зв'язок представлений за допомогою червоних пунктирних ліній. Фази I і III володіють симетрією $J_1 \leftrightarrow J_X$, згаданою вище.

Щодо природи фазових переходів, то I-II і II-III належать до фазових переходів першого роду. З іншого боку, перехід із IDP в магнітні фази I і III є фазовим переходом другого роду. Перехід із вершини товстої темно-червоної лінії в IDP-фазі в фазу II є фазовим переходом першого роду. Фазовий перехід залишається фазовим переходом першого роду вздовж IDP-II аж до двох потрібних точок, які розділяють IDP-I-II і IDP-II-III фази.

Вивчення фазових переходів першого роду показало добру кількісну зго-

ду між теорією середнього поля для бозонів Швінгера та точною діагоналізацією (див. рис. 1.11). Теорія середнього поля для бозонів Швінгера є єдиним використанням методом, який потенційно дозволяє оцінити всі критичні лінії незалежно від характеру переходу (див. рис. 1.11). На відміну від фазових переходів першого роду, критичні лінії для фазових переходів другого роду отримані допоміжними числовими методами визначають тільки можливі точки переходів (див. рис. 1.11).

Ще одним цікавим дослідженням, що стосується шестикутної двошарової ґратки є робота [63]. Це дослідження присвячене виявленню природи виникнення магнітної фрустрації в сполуці $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Використання теорії функціоналу густини для *ab initio* розрахунків дозволило авторам побудувати ефективний спіновий гамільтоніан для цієї сполуки. Запропонований гамільтоніан складається з антиферромагнітних гайзенберґівських членів із константами взаємодії в діапазоні до третіх найближчих сусідів у окремому шарі та четвертих найближчих сусідів між шарами (див. рис. 1.12). Симуляції Монте Карло дозволили отримати температурні залежності для магнітної сприйнятливості та температуру Кюрі-Вейса, а також знайти константи зв'язку, які дуже добре збігаються з експериментальними значеннями.

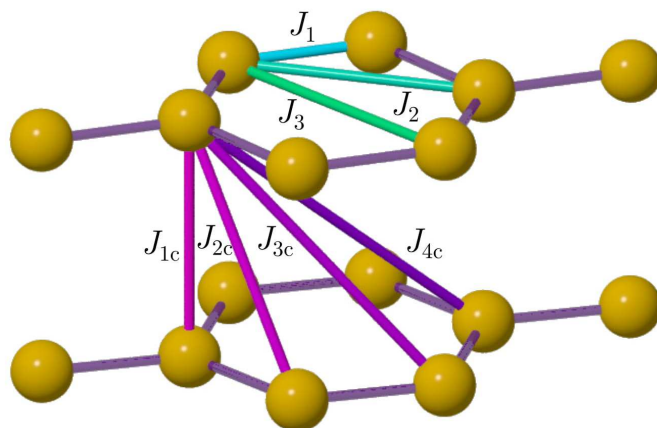


Рис. 1.12. Константи взаємодії в шестикутній двошаровій ґратці. Рисунок узято з [63].

Застосований *ab initio* LDA+ U метод із $U = 1.5$ eV дозволив показати, що гамільтоніан містить тільки білінійні гайзенберґівські члени. Симуляції за допомогою класичного Монте Карло та обчислення методом ренормгрупи для матриці

густини, здійснені для спінового гамільтоніана, не показали жодних слідів дальнього порядку аж до нульової температури. Дивно, що в сполуці $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ міждимерні взаємодії є такими, що дозволяють їй перебувати на фазовій границі двох колінеарних магнітних конфігурацій N_1 та N_2 (див. рис. 1.13). Справді, міжшарові взаємодії J_{1c} та J_{3c} (див. рис. 1.12) підтримують впорядкування N_1 , тоді як J_{2c} та J_{4c} сприяють стану N_2 . Тому рівновага між цими двома наборами зв'язків приводить до того, що ця сполука перебуває на N_1 - N_2 фазовій границі.

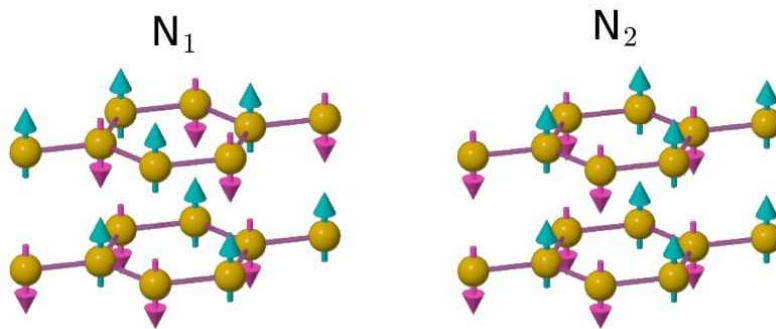


Рис. 1.13. Конфігурації різних фаз для шестикутної двошарової ґратки. Рисунок узято з [63].

Отже, в присутності будь-якої нерівноважності, спричиненої впливом напруження, тиску, хімічного легування та ін. очікується перехід у N_1 або N_2 впорядковані стани. У цій дуже особливій точці спин-спин кореляції в кожному шарі є типу Нееля. Проте спостерігається майже повна відсутність кореляції між двома шарами, роблячи динаміку двох станів Нееля некорельованою. Варто наголосити, що присутність достатньо сильної спин-ґраткової взаємодії могла б спричинити спин-пайерлсові деформації ґратки й отже, зняти спінову фрустрацію. Причина того, що такий перехід не спостерігався експериментально, може полягати в малій спин-орбітальній взаємодії в атомах Mn, яка робить температурний масштаб, відповідно до магнітопружної взаємодії, занадто малим, щоб спричинити спостережувані статичні деформації ґратки в сполуці $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ аж до 50 мК.

У статті [64] вивчена квантова фрустрована антиферромагнітна модель Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці. У кожному шарі розглядаються антиферромагнітні взаємодії з найближчими сусідами (J_1), між наступними найближ-

чими сусідами (J_2) і між третіми найближчими сусідами (J_3). Такі два шари зв'язані між собою антиферромагнітною обмінною взаємодією на вертикальному зв'язку ($J_1^\perp \equiv \delta J_1$). Модель вивчена для довільних значень параметра δ вздовж лінії $J_3 = J_2 \equiv \alpha J_1$, що включає в себе точку найбільшої фрустрації $\alpha = 1/2$, де класичний основний стан є макроскопічно вироджений. Для дослідження моделі

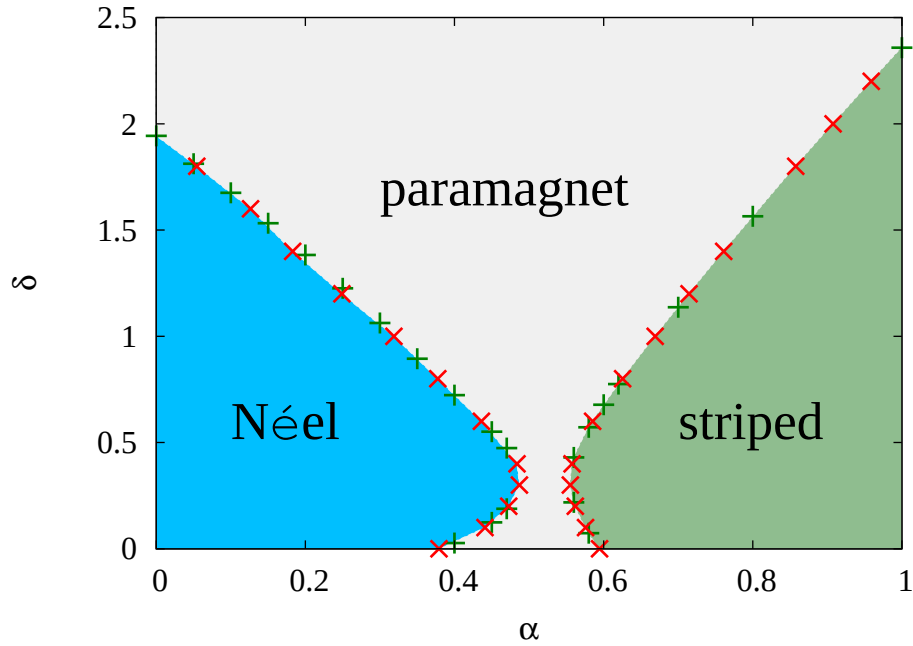


Рис. 1.14. Фазова діаграма для шестикутної двошарової ґратки при $T = 0$. Рисунок узят з [64].

було застосовано метод взаємодіючих кластерів із дуже високим порядком наближення, що дозволило отримати точний опис для квантової фазової діаграми при $T = 0$ в діапазоні $0 \leq \alpha \leq 1$, $0 \leq \delta \leq 1$ в $\alpha\delta$ -площині (див. рис. 1.14). Границі фаз визначалися з точок, отриманих наближенням LSUB_∞ , в яких магнітний параметр порядку зникає. Ці точки визначені з екстраполяції результатів LSUB_n для обох квазікласичних антиферромагнітних фаз. Точки на двох фазових границях, що виокремлюють фазу Нееля та страйп фазу, представлені при фіксованих значеннях α та фіксованих значеннях δ . Точки, позначені зеленими плюсами (+) (див.рис. 1.14), представляють відповідні точки $\delta_{c_1}^>(\alpha)$ [а також $\delta_{c_1}^<(\alpha)$ для фіксованого α в діапазоні $\alpha_{c_1}(0) < \alpha < \alpha_1^>$] для фази Нееля і $\delta_{c_2}^>(\alpha)$ [а також $\delta_{c_2}^<(\alpha)$ для фіксованого α в діапазоні $\alpha_2^< < \alpha < \alpha_{c_2}(0)$] для страйп фази. Точки, позна-

чені червоними хрестиками ($\times$) (див. рис. 1.14), представляють точки $\alpha_{c_1}(\delta)$ для фази Нееля та $\alpha_{c_2}(\delta)$ для страйп фази. З рисунка 1.14 видно, що на обидвох фазових границях два набори критичних точок, одержаних із повністю незалежних результатів при фіксованих значеннях α і фіксованих значеннях δ , збігаються надзвичайно добре одні з одними.

Авторами роботи [65] було показано, що спін-1/2 антиферромагнетик Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці проявляє велике різноманіття квазікласичних та чисто квантових фаз, які контролюються взаємодією між внутрішаровою фрустрацією та міжшаровим обміном. У дослідженні беруться до уваги зв'язки між найближчими сусідами в окремому шарі (J_1), зв'язки між наступними сусідами в окремому шарі (J_2) та зв'язки між найближчими сусідами між шарами ($J_\perp$). Для отримання фазової діаграми було використано три допоміжні техніки: теорія середнього поля для бозонів Швінгера [70], оператори на зв'язку [71] та розвинення в ряди [72].

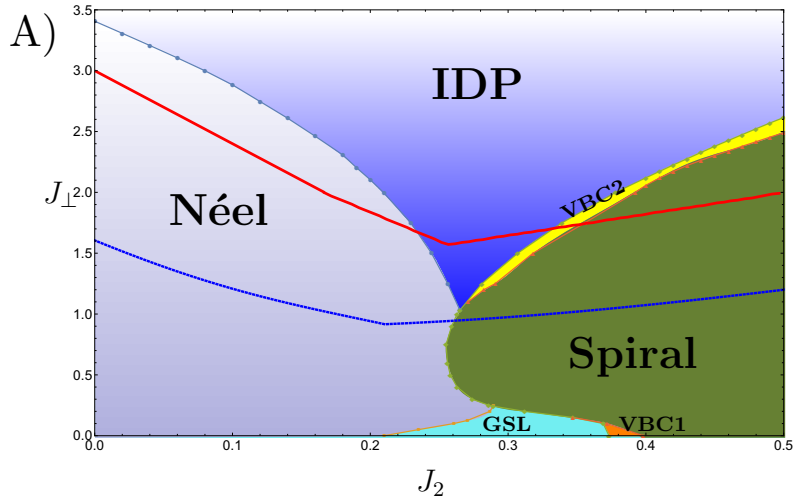


Рис. 1.15. Фазова діаграма для шестикутної двошарової ґратки. Рисунок узятो з [65].

На класичному рівні, коли $S \rightarrow \infty$, і в границі окремого шару, тобто, при $J_\perp = 0$, спостерігаються дві фази: порядок Нееля для $J_2/J_1 < 1/6$ і спіральний порядок для $J_2/J_1 > 1/6$. Включаючи міжшарову взаємодію, ця точка переходу продовжується в лінію, незалежно від $J_\perp$. Квантові флюктуації приводять до нових некласичних проміжних фаз і перенормовують фазу Нееля та

спіральну фазу. Попередні дослідження [73] виявили фазові переходи другого роду в дві чисто квантові фази, спричинені фрустрацією: спінову рідину з щільною в енергетичному спектрі (GLP), яка зберігає всі ґраткові симетрії для $0.2075 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0.3732$, і шахово-димерну ґраткову нематичну фазу (VBC1), яка зберігає симетрії $SU(2)$ спінових поворотів та ґраткових трансляцій, але порушує Z_3 симетрію, яка відповідає поворотам на $2\pi/3$ навколо осі перпендикулярної до площини для $0.3732 \lesssim J_2/J_1 \lesssim 0.398$. Інший граничний випадок, коли $J_\perp \rightarrow \infty$. Тут формується фаза, що відповідає добутку вертикальних димерів (IDP). Поєднуючи ці дві границі, взаємодія між міжшаровими зв'язками $J_\perp$ та фрустрованими зв'язками J_2 розкриває складну фазову діаграму (див. рис. 1.15). Рисунок 1.15 показує, що малі міжшарові взаємодії продовжують області стійкості вздовж напрямку J_2 для фази Нееля та спіральної фази, ведучи навіть до області конкуренції. Проте, для достатньо великого $J_\perp$ квазікласичні фази перериваються і є стиснутими на користь фази IDP. Стосовно фаз GSL і VBC1, міжшарова взаємодія має сильні наслідки, стискаючи їх дуже швидко й здійснюючи повторне входження в квазікласичні фази при скінченному $J_\perp$. Нарешті, перехід із фази Нееля в IDP фазу є прямим. Але це не так для переходу зі спіральної фази в IDP фазу. Фактично, там виявлено іншу ґраткову нематичну область (VBC2), яка "вклинюється" у фазовій діаграмі, як видно на рисунку 1.15.

Класична модель Ізинга на антиферромагнітній шестикутній двошаровій ґратці досліджувалася в праці [66] за нульової температури $T = 0$, а також при скінченних низьких температурах $T \neq 0$. У кожному випадку модель розглядалася як за відсутності магнітного поля $h = 0$ так і за його наявності $h > 0$. Основним результатом роботи є побудовані фазові діаграми при різних значеннях антиферромагнітних зв'язків J_1 (взаємодія між найближчими сусідами в окремому шарі), J_p (взаємодія між найближчими сусідами між шарами) і J_x (фрустрована взаємодія між наступними найближчими сусідами між шарами) та різних значеннях температури T і магнітного поля h .

На рисунку 1.16(a) показано фазову діаграму " $J_x/J_p - J_1/J_p$ " при $T = 0$ за відсутності магнітного поля. Цікаві особливості можна спостерігати на лінії $J_x =$

Табл. 1.2. Конфігурації плакеток, енергія ($\mathcal{E}_0$), намагніченість (m_0) і кратність виродження $\mathcal{D}$. Таблицю узято з [66].

	Notation	$\mathcal{E}_0$	m_0	$\mathcal{D}$
	AF ₁	$2(J_p/3 - J_1 - J_x)$	0	2
	AF ₂	$2(-J_p/3 - J_1 + J_x)$	0	2
	U ₂	$2(-J_p/3 + J_1 - J_x)$	0	2
	UAF	$-2h/3$	1/2	4
	U	$2(J_p/3 + J_1 + J_x - 2h/3)$	1	1

$J_1 < J_p/3$, де основний стан є сильно вироджений через те, що кожна плакетка може бути або в конфігурації U₂, або в конфігурації AF₂ (див. табл. 1.2). Енергія не залежить від J_p , тому пара J_p може бути перевернута без затрати енергії. Як наслідок, система має макроскопічне виродження й ненульову ентропію при $T = 0$. У сильно фрустрованій точці $J_1 = J_x = J_p/3$ крім вироджених конфігурацій є стани, коли всі плакетки перебувають у AF₁ конфігурації (див. табл. 1.2).

Вплив наявності зовнішнього магнітного поля також представлений на рисунку 1.16, де є показані фазові діаграми " $h/J_p - J_1/J_p$ " в трьох різних областях для фрустрованого співвідношення $\alpha = J_x/J_1$: (b) $\alpha = 1$, (c) $\alpha = 1/2$, (d) $\alpha = 2$. Конфігурація UAF є сильно виродженою: одна пара J_p спінів плакетки має позитивний (+) спін, інша має два протилежні спіни. Ця пара не має орієнтації, тому в кожній елементарній комірці є одна ступінь вільності.

На рисунках 1.17 і 1.18 представлені фазові діаграми при низьких температурах. За відсутності магнітного поля система проявляє різні фазові переходи. У випадку $J_1 \neq J_x$ і $J_1 = J_p$ для $J_x < J_p/3$ основним станом є AF₂, а для $J_x > J_p/3$ — AF₁ (див. рис 1.17). Лінії фазових переходів отримані в наближенні Бете та з симуляцій методом Монте Карло. Ці фазові переходи є фазовими переходами другого роду. Вони пов'язані з порушенням симетрії $\mathcal{Z}_2$.

На рисунку 1.18 представлена фазова діаграма " $J_x/J_p - T/J_p$ " у випадку,

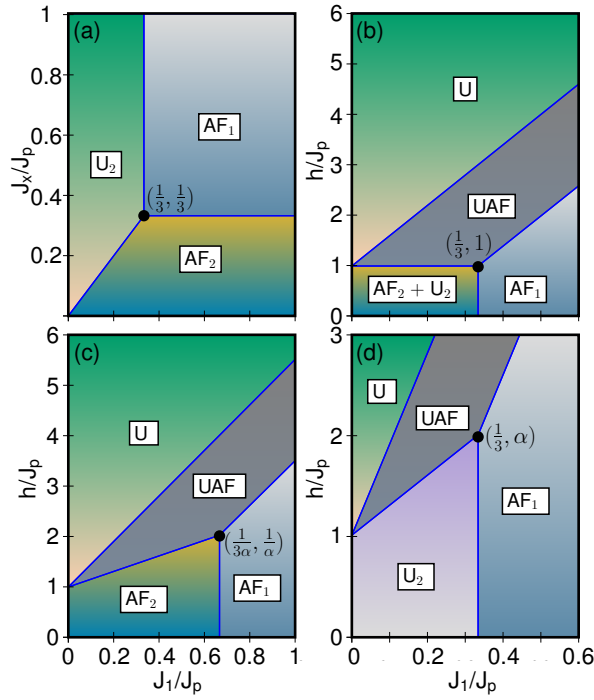


Рис. 1.16. Фазові діаграми для шестикутної двошарової ґратки при $T = 0$. Рисунок узятो з [66].

коли $J_1 = J_X$, де система проявляє ряд цікавих та різних явищ при низьких температурах. Лінії переходів і трикритична точка одержані в наближенні Бете. Точки відповідають максимуму теплоємності в симуляціях методом Монте Карло. Можна ідентифікувати три типи поведінки: (1) кооперативна парамагнітна фаза для $J_1 = J_X < J_p/3$, (2) фазовий перехід першого роду з парамагнітної фази в фазу AF_1 для $J_p/3 < J_1 = J_X < J^* \approx 0.45J_p$ і (3) фазовий перехід другого роду з парамагнітної фази в фазу з порушеною симетрією $\mathcal{Z}_2$ (AF_1) для $J_1 = J_X > J^*$.

Включення зовнішнього магнітного поля може привести спінову систему у фази з високою енергією, які недоступні при $h = 0$. Для вивчення впливу зовнішнього поля порівнюються стан із намагніченістю $m = 0$ для $J_1 = 0.2J_p$, $J_X = 0.5J_p$ (див. рис. 1.19, праві панелі) із сильно фрустрованим випадком $J_1 = J_X = J_p/3$ (див. рис. 1.19, ліві панелі). Фази з $m = 0$ (див. табл. 1.2) мають ті самі властивості, що й для $h = 0$. Перехід із парамагнітної фази в фазу з $m = 1/2$ є фазовим переходом другого роду відповідно до наближення Бете; це підтверджують симуляції методом Монте Карло. На рисунку 1.19 буква s позначає ентропію на один вузол.

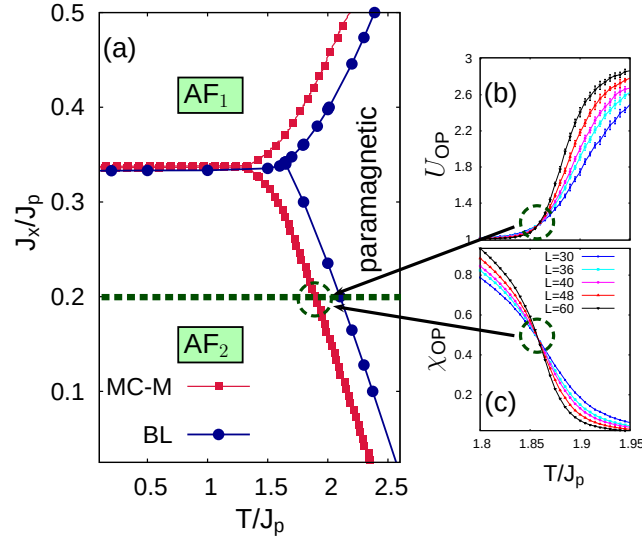


Рис. 1.17. Фазова діаграма для шестикутної двошарової ґратки при низьких температурах за відсутності магнітного поля, коли $J_1 \neq J_x$. Рисунок узято з [66].

Для квантового антиферромагнетика Гайзенберга, заданого на фрустрованій квадратній двошаровій ґратці, досліджувалася фазова діаграма в залежності від параметрів обмінної взаємодії [67]. Було показано, що фрустрована $S = 1/2$ квадратна двошарова ґратка лише із антиферромагнітними взаємодіями Гайзенберга, має лінію критичних точок при скінченних температурах, пов'язаних із лінією переходів першого роду на її фазовій діаграмі при $T = 0$. Друга лінія фазових переходів другого роду із димер-синглетної фази в фазу впорядкованого двошару закінчується на першій лінії, утворюючи квантову критичну кінцеву точку (QCEP) (див. рис. 1.20).

Фазова діаграма для квантового антиферромагнетика Гайзенберга при нульовій температурі представлена на рисунку 1.20. Можливими є три різні фази: димер-синглетна (DS), димер-триплетний антиферромагнетик (DTAF) і двошаровий антиферромагнетик (BAF). Вставки в кожній із областей представляють схематичне зображення цих фаз. На кожному вузлі знаходиться $S = 1/2$ квантовий спін. Еліпсоїди представляють синглетні стани двох спінів. Гайзенберґівські взаємодії між спінами є такими: вертикальні зв'язки ($J_\perp$), зв'язки в окремому шарі ($J_\parallel$) та фрустровані зв'язки (J_x). Лінія переходів першого роду з фази DTAF в DS

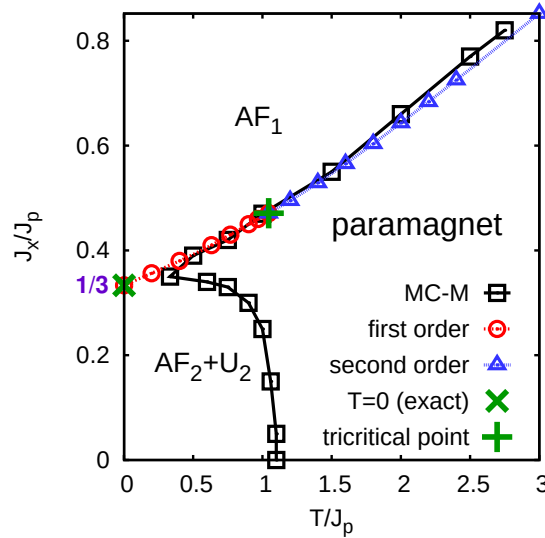


Рис. 1.18. Фазова діаграма для шестикутної двошарової ґратки при низьких температурах за відсутності магнітного поля, коли $J_1 = J_x$. Рисунок узятो з [66].

або в BAF фази показана на рисунку чорним кольором, а лінія переходів другого роду з фази DS в BAF фазу — червоним. Червона тінь, що покриває червону лінію, відповідає за похибки обчислення. Сині символи позначають квантові фазові переходи в нефрустрованому (ромбики) і в повністю фрустрованому (трикутники) двошарах. Червона зірка позначає QSEP, де червона лінія закінчується на чорній.

Для побудови фазової діаграми використовувалися числові методи: симуляції методом квантового Монте Карло, в якому відсутня проблема знаку в повністю фрустрованій границі, а також обчислення за допомогою тензорних мереж для дослідження околу квантової критичної кінцевої точки. Симуляції методом Монте Карло показали, що критична точка в повністю фрустрованій границі належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга.

Варто також пригадати інший клас систем, в яких присутні димери. Це так звані димеризовані системи, коли кожному вузлу ґратки можна поставити у відповідність димер. Такі системи є цікавими тим, що вони реалізуються в реальних сполуках, таких як $TlCuCl_3$; у них можна вивчати магнетокалоричні ефекти, переходи Березінського-Костерліца-Таулеса, конденсацію Бозе-Айнштейна [74–76].

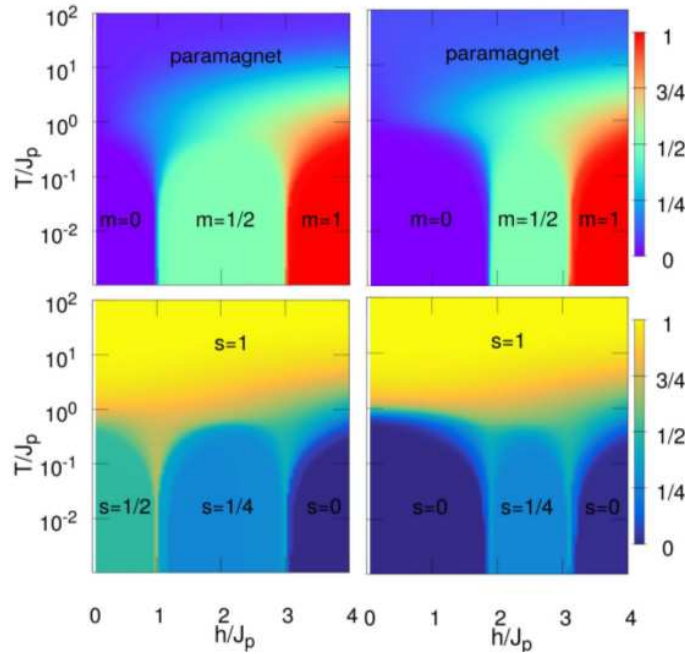


Рис. 1.19. Фазові діаграми для шестикутної двошарової ґратки при низьких температурах за наявності зовнішнього магнітного поля для різних значень s та m . Рисунок узятो з [66].

Цікавими є роботи, в яких використовується простий варіаційний метод для побудови фазових діаграм основного стану димеризованих антиферромагнетиків у магнітному полі [77, 78]. Досліджена в цих роботах модель відповідає реальній сполуці KCuCl_3 . Результати досліджень узгоджуються з експериментами.

Із обговореної літератури, зрозуміло, що двошарові структури викликають постійний інтерес як в експериментаторів, так і в теоретиків. Експериментальні дослідження дозволяють виявити цікаві властивості таких сполук і допомагають вибирати кращі моделі для їх опису. З іншого боку, теоретичне вивчення двошарових структур потрібне для кращого розуміння незвичайних властивостей і передбачень нових властивостей, які ще потребують підтвердження. Приклади відкритих питань, які стосуються двошарових ґраток: розроблення теорії для опису низькотемпературних властивостей сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у магнітному полі; дослідження антиферромагнітної моделі Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці у магнітному полі й можливість її застосування до сполуки $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$; дослідження низькотемпературних властивостей трикутного двошару у магнітно-

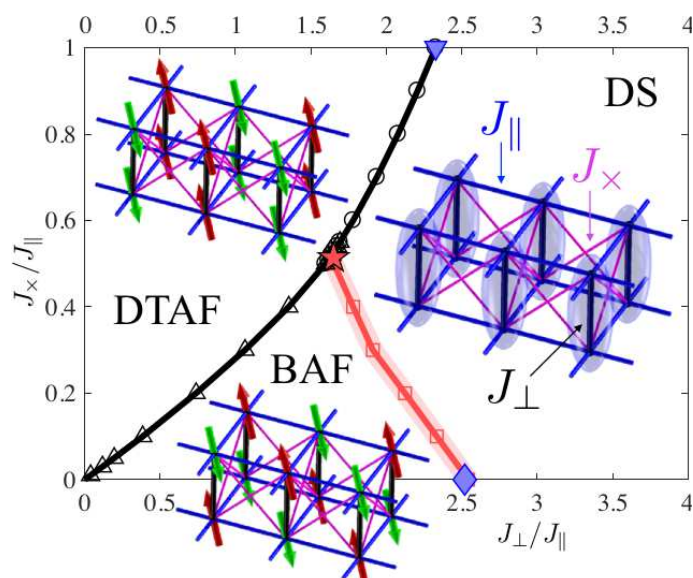


Рис. 1.20. Фазова діаграма для квадратної двошарової ґратки в основному стані.
Рисунок узято з [67].

му полі, на якому задана модель Гайзенберга. Їх розв'язанню присвячені подальші розділи дисертації.

РОЗДІЛ 2

ФАЗОВІ ДІАГРАМИ КВАНТОВОГО АНТИФЕРОМАГНЕТИКА ГАЙЗЕНБЕРГА НА ДВОШАРАХ ПРИ $T = 0$ В НУЛЬОВОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Тут розглядається спін-1/2 модель Гайзенберга з гамільтоніаном

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad (2.1)$$

де ламані дужки означають суму за зв'язками двошару. Антиферромагнітні константи обмінного зв'язку $J_{ij} > 0$ набувають трьох значень: J_2 (димерні міжшарові зв'язки між найближчими сусідами), J_1 (внутрішньшарові зв'язки між найближчими сусідами) і J_X (міжшарові зв'язки між наступними найближчими сусідами) (див. рис. 2.1). Відповідно до співвідношень між величинами зв'язків J_2 , J_1 і J_X , можна розглянути дві різні області з відповідними анзацами варіаційної хвильової функції: $J_1 \gg J_X$ (або $J_1 \ll J_X$) і $J_1 \approx J_X$ у режимі сильних і слабких J_2 . Поєднуючи результати отримані в кожній із областей, можна побудувати повну фазову діаграму основного стану.

2.1. Квадратна двошарова ґратка

2.1.1. Область $J_1 \gg J_X$

Розпочнемо вивчення з області, коли $J_1 \gg J_X$ (або $J_1 \ll J_X$). В цьому випадку варіаційний стан вибираємо в такому вигляді:

$$|\Psi_{\text{var}}\rangle = \text{П}_{\text{v.b.}} \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} (|\uparrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle - \alpha |\downarrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle)_{\text{v.b.}}, \quad (2.2)$$

де m і n позначають вузли на ґратці, а числа 1 і 2 позначають номер шару (див. рис. 2.1); $0 \leq \alpha \leq 1$ — варіаційний параметр, який буде знайдено з мінімуму варіаційної енергії $E(\alpha) = \langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle$. Граничний випадок $\alpha = 0$ (режим слабких J_2) відповідає стану Нееля, а інший випадок $\alpha = 1$ (режим сильних J_2) відповідає синглетному стану на димерах.

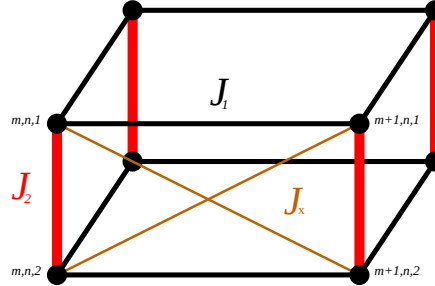


Рис. 2.1. Елемент квадратної двошарової ґратки. Цілі числа m і n визначають розташування вузла у шарі, а числа 1 і 2 позначають номер шару. Вертикальні димерні (червоні) зв'язки мають константу взаємодії J_2 . Внутрішньшарові (чорні) зв'язки між найближчими сусідами мають константу взаємодії J_1 . Фрустровані міжшарові (коричневі) зв'язки мають константу J_x .

Для подальших обчислень пригадаймо деякі корисні співвідношення:

$$\begin{aligned} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j &= \frac{1}{2}(s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+) + s_i^z s_j^z; \\ s_i^+ |\downarrow_i\rangle &= |\uparrow_i\rangle, \quad s_i^+ |\uparrow_i\rangle = 0, \\ s_i^- |\uparrow_i\rangle &= |\downarrow_i\rangle, \quad s_i^- |\downarrow_i\rangle = 0, \\ s_i^z |\uparrow_i\rangle &= \frac{1}{2} |\uparrow_i\rangle, \quad s_i^z |\downarrow_i\rangle = -\frac{1}{2} |\downarrow_i\rangle. \end{aligned} \quad (2.3)$$

Перепишемо гамільтоніан (2.1) у зручній формі:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \left[\frac{1}{2} (s_i^+ s_j^- + s_i^- s_j^+) + s_i^z s_j^z \right]. \quad (2.4)$$

Щоб отримати вираз для варіаційної енергії $E(\alpha)$, потрібно обчислити декілька середніх значень за пробною варіаційною хвильовою функцією $|\Psi_{\text{var}}\rangle$: $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle$, $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle$ і $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,1} | \Psi_{\text{var}} \rangle$. Цих середніх значень достатньо для того, щоб записати весь вираз для енергії, попередньо вра-

хувавши кількість зв'язків димера з найближчими сусідами. Знайдемо перше середнє значення, подіявши відповідними спіновими операторами на варіаційний стан $|\Psi_{\text{var}}\rangle$:

$$\begin{aligned} & (s_{m,n,1}^+ s_{m,n,2}^- + s_{m,n,1}^- s_{m,n,2}^+) |\Psi_{\text{var}}\rangle \\ &= \dots \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} (|\downarrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle - \alpha |\uparrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle) \dots, \\ s_{m,n,1}^z s_{m,n,2}^z |\Psi_{\text{var}}\rangle &= \dots \left(-\frac{1}{4}\right) \frac{1}{\sqrt{1+\alpha^2}} (|\uparrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle - \alpha |\downarrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle) \dots \quad (2.5) \end{aligned}$$

Середнє значення $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle$ з врахуванням виразів із (2.5) буде таким:

$$\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle = \frac{1}{2} \left(-\frac{2\alpha}{1+\alpha^2} \right) - \frac{1}{4} \frac{1+\alpha^2}{1+\alpha^2} = -\frac{\alpha}{1+\alpha^2} - \frac{1}{4}. \quad (2.6)$$

Тепер порахуємо друге середнє значення:

$$\begin{aligned} & (s_{m,n,1}^+ s_{m+1,n,1}^- + s_{m,n,1}^- s_{m+1,n,1}^+) |\Psi_{\text{var}}\rangle \\ &= \dots \frac{-\alpha}{1+\alpha^2} |\uparrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle |\downarrow_{m+1,n,1} \downarrow_{m+1,n,2}\rangle \dots \\ &+ \dots \frac{-\alpha}{1+\alpha^2} |\downarrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle |\uparrow_{m+1,n,1} \uparrow_{m+1,n,2}\rangle \dots, \\ & s_{m,n,1}^z s_{m+1,n,1}^z |\Psi_{\text{var}}\rangle \\ &= \dots \frac{1}{4} \frac{1}{1+\alpha^2} (|\uparrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle + \alpha |\downarrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle) \\ & (|\uparrow_{m+1,n,1} \downarrow_{m+1,n,2}\rangle + \alpha |\downarrow_{m+1,n,1} \uparrow_{m+1,n,2}\rangle) \dots, \quad (2.7) \end{aligned}$$

$$\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,1} | \Psi_{\text{var}} \rangle = \frac{1}{4} \left(\frac{1-\alpha^2}{1+\alpha^2} \right)^2. \quad (2.8)$$

Обчислимо останнє необхідне середнє значення:

$$\begin{aligned} & (s_{m,n,1}^+ s_{m+1,n,2}^- + s_{m,n,1}^- s_{m+1,n,2}^+) |\Psi_{\text{var}}\rangle \\ &= \dots \frac{\alpha^2}{1+\alpha^2} |\uparrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle |\downarrow_{m+1,n,1} \downarrow_{m+1,n,2}\rangle \dots \\ &+ \dots \frac{1}{1+\alpha^2} |\downarrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle |\uparrow_{m+1,n,1} \uparrow_{m+1,n,2}\rangle \dots, \\ & s_{m,n,1}^z s_{m+1,n,2}^z |\Psi_{\text{var}}\rangle \end{aligned}$$

$$= \dots \left(-\frac{1}{4} \right) \frac{1}{1 + \alpha^2} (|\uparrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle + \alpha |\downarrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle) \\ (|\uparrow_{m+1,n,1} \downarrow_{m+1,n,2}\rangle + \alpha |\downarrow_{m+1,n,1} \uparrow_{m+1,n,2}\rangle) \dots, \quad (2.9)$$

$$\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle = -\frac{1}{4} \left(\frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2} \right)^2. \quad (2.10)$$

Об'єднуючи (2.6), (2.8) і (2.10) та враховуючи кількість зв'язків, одержуємо вираз для варіаційної енергії на один димер:

$$\frac{E(\alpha)}{\mathcal{N}} = \frac{\langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle}{\mathcal{N}} = - \left(\frac{\alpha}{1 + \alpha^2} + \frac{1}{4} \right) J_2 + \left(\frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2} \right)^2 (J_1 - J_X), \quad (2.11)$$

де $\mathcal{N}$ — число димерів.

Далі потрібно знайти такі значення параметра α , при яких варіаційна енергія $E(\alpha)$ стає мінімальною. Для цього обчислимо від неї першу похідну по варіаційному параметру та прирівняємо до нуля, щоб виявити точки екстремумів. Одержимо рівняння:

$$(\alpha^2 - 1)(J_2 \alpha^2 + J_2 + 8\alpha J_1 - 8\alpha J_X) = 0. \quad (2.12)$$

Це рівняння має чотири розв'язки:

$$\alpha_{1,2} = \pm 1, \\ \alpha_{3,4} = \frac{4}{J_2} (J_X - J_1) \pm \sqrt{\frac{16}{J_2^2} (J_1 - J_X)^2 - 1}. \quad (2.13)$$

Тільки два розв'язки з (2.13) задовольняють умові $0 \leq \alpha \leq 1$. Енергія $E(\alpha)$ є мінімальною при:

$$\alpha = \begin{cases} \frac{4}{J_2} (J_X - J_1) - \sqrt{\frac{16}{J_2^2} (J_1 - J_X)^2 - 1}, & J_2 \leq 4(J_1 - J_X), \\ 1, & J_2 \geq 4(J_1 - J_X). \end{cases} \quad (2.14)$$

Таким чином, енергія основного стану (розрахована на один димер) задається виразами:

$$\frac{E_0}{\mathcal{N}} = \begin{cases} \frac{J_2}{4} + (J_1 - J_X) \left(1 - \frac{J_2}{4(J_1 - J_X)} \right)^2, & J_2 \leq 4(J_1 - J_X), \\ -\frac{3J_2}{4}, & J_2 \geq 4(J_1 - J_X). \end{cases} \quad (2.15)$$

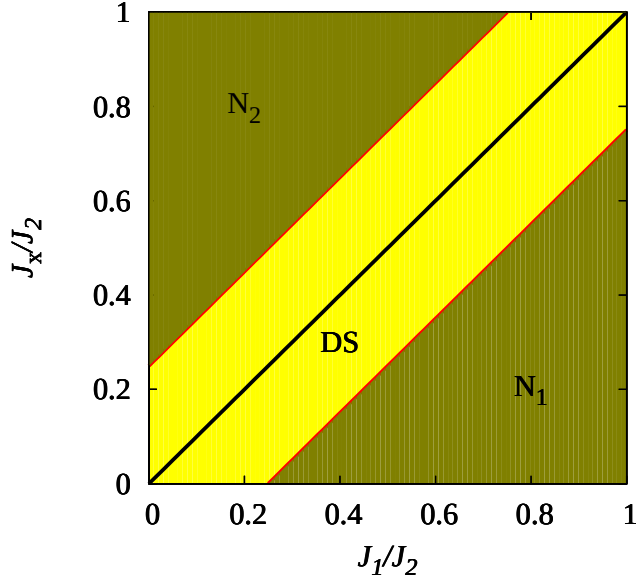


Рис. 2.2. Фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах J_1/J_2 – J_x/J_2 . Червоні критичні лінії відділяють димер-синглетну фазу (DS , жовта область) від фаз із антиферомагнітним порядком (N_1 і N_2 , оливкові області). Чорна лінія позначає граничний випадок повної фрустрації $J_x = J_1$. Структура фаз представлена на рисунку 2.4.

На рисунку 2.2 представлена фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки. Криві, які обмежують різні фази, отримано за допомогою порівняння енергій синглетного стану та стану Нееля. На цій діаграмі можна виділити три області: центральна ($\alpha = 1$), яка відповідає димер-синглетній фазі (DS , див. рис. 2.4, права панель) та дві інші ($\alpha < 1$), які відповідають антиферомагнітним фазам із різною структурою (N_1 , див. рис. 2.4, ліва панель; N_2 , див. рис. 2.4, центральна панель). Ця фазова діаграма побудована і в інших координатах (див. рис. 2.3). Товста чорна лінія на фазових діаграмах відповідає випадку максимальної фрустрації, коли $J_1 = J_x$.

Основний стан квадратної двошарової ґратки досліджувався за допомогою варіаційного підходу раніше в роботі [79], але без врахування міждимерних взаємодій J_x . Тобто вже на цьому етапі можна здійснити порівняння з наявними результатами. Наша фазова діаграма (див. рис. 2.3) відтворює точку на осі J_2/J_1 , яка отримана в роботі [79].

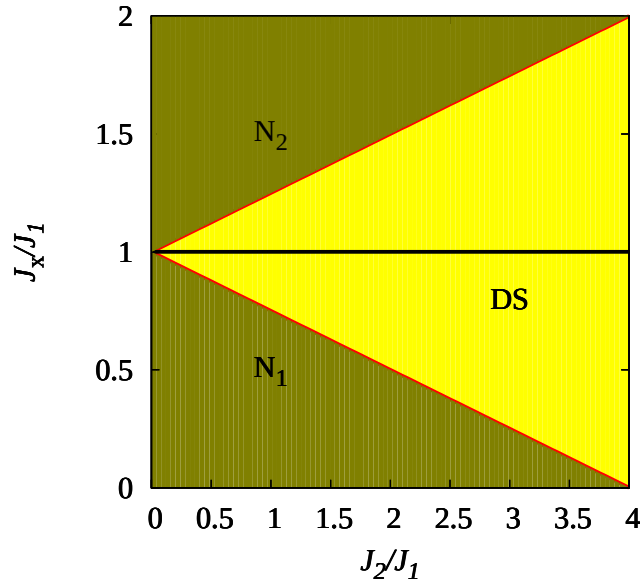


Рис. 2.3. Фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах $J_2/J_1 - J_x/J_1$. Червоні критичні лінії відділяють димер-синглетну фазу (DS , жовта область) від фаз із антиферомагнітним порядком (N_1 і N_2 , оливкові області). Чорна лінія позначає граничний випадок повної фрустрації $J_x = J_1$.

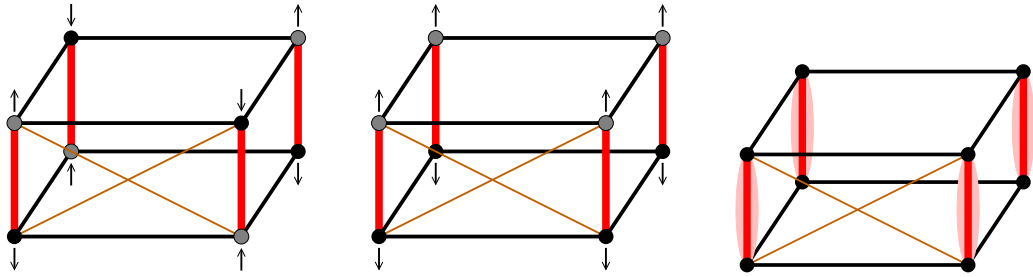


Рис. 2.4. Структура фаз. Перша та друга структури антиферомагнітних станів описують N_1 і N_2 фази відповідно. Третя структура описує димер-синглетну фазу.

2.1.2. Область $J_1 \approx J_x$

Перейдемо до іншого випадку, коли міждимерні взаємодії J_1 і J_x є приблизно однаковими, тобто $J_1 \approx J_x$. У цьому режимі вибираємо таку варіаційну хвильову функцію:

$$|\Psi_{\text{var}}\rangle = \Pi_{\text{v.b.}} \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) \right]$$

$$+\sqrt{1-\beta^2}\left(\frac{1+(-1)^{m+n}}{2}|\uparrow_1\uparrow_2\rangle+\frac{1-(-1)^{m+n}}{2}|\downarrow_1\downarrow_2\rangle\right)\Big]_{\text{v.b.}}, \quad (2.16)$$

де $m+n$ може бути або парним (одна підґратка), або непарним (інша підґратка), а числа 1 і 2 відповідають першому та другому шарам відповідно (див. рис. 2.1); $0 \leq \beta \leq 1$ — варіаційний параметр, який знаходиться з мінімуму варіаційної енергії $E(\beta) = \langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle$. Граничний випадок $\beta = 0$ (режим слабких J_2) відповідає триплетному стану на димерах, а інший випадок $\beta = 1$ (режим сильних J_2) відповідає синглетному стану на димерах.

Обчислимо середні значення $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle$, $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle$ та $\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,1} | \Psi_{\text{var}} \rangle$, використовуючи пробний варіаційний стан (2.16). Зробимо розрахунки для першого середнього значення:

$$\begin{aligned} & (s_{m,n,1}^+ s_{m,n,2}^- + s_{m,n,1}^- s_{m,n,2}^+) | \Psi_{\text{var}} \rangle \\ &= \dots \left[-\frac{\beta}{\sqrt{2}} |\uparrow_1\downarrow_2\rangle_{m,n} + \frac{\beta}{\sqrt{2}} |\downarrow_1\uparrow_2\rangle_{m,n} \right] \dots, \\ & \quad s_{m,n,1}^z s_{m,n,2}^z | \Psi_{\text{var}} \rangle \\ &= \dots \left[-\frac{1}{4} \frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)_{m,n} + \frac{1}{4} \sqrt{1-\beta^2} |\uparrow_1\uparrow_2\rangle_{m,n} \right] \dots, \end{aligned} \quad (2.17)$$

$$\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle = \frac{1}{4} - \beta^2. \quad (2.18)$$

Порахуємо друге середнє значення:

$$\begin{aligned} & (s_{m,n,1}^+ s_{m+1,n,1}^- + s_{m,n,1}^- s_{m+1,n,1}^+) | \Psi_{\text{var}} \rangle \\ &= \dots - \frac{\beta}{\sqrt{2}} |\uparrow_1\uparrow_2\rangle_{m,n} \frac{\beta}{\sqrt{2}} |\downarrow_1\downarrow_2\rangle_{m+1,n} \\ & \quad + \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} |\downarrow_1\downarrow_2\rangle_{m,n} + \sqrt{1-\beta^2} |\downarrow_1\uparrow_2\rangle_{m,n} \right] \\ & \quad \left[-\frac{\beta}{\sqrt{2}} |\uparrow_1\uparrow_2\rangle_{m+1,n} + \sqrt{1-\beta^2} |\uparrow_1\downarrow_2\rangle_{m+1,n} \right] \dots, \\ & \quad s_{m,n,1}^z s_{m+1,n,1}^z | \Psi_{\text{var}} \rangle \\ &= \dots \frac{1}{4} \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)_{m,n} + \sqrt{1-\beta^2} |\uparrow_1\uparrow_2\rangle_{m,n} \right] \\ & \quad \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)_{m+1,n} - \sqrt{1-\beta^2} |\downarrow_1\downarrow_2\rangle_{m+1,n} \right] \dots, \end{aligned} \quad (2.19)$$

$$\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,1} | \Psi_{\text{var}} \rangle = -\frac{1}{2}\beta^2(1 - \beta^2) - \frac{1}{4}(1 - \beta^2)^2. \quad (2.20)$$

І розрахуємо останнє необхідне середнє значення:

$$\begin{aligned} & (s_{m,n,1}^+ s_{m+1,n,2}^- + s_{m,n,1}^- s_{m+1,n,2}^+) | \Psi_{\text{var}} \rangle \\ &= \dots \frac{\beta}{\sqrt{2}} |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle_{m,n} \frac{\beta}{\sqrt{2}} |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle_{m+1,n} \\ &+ \left(\frac{\beta}{\sqrt{2}} |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle_{m,n} + \sqrt{1 - \beta^2} |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle_{m,n} \right) \\ &\left(\frac{\beta}{\sqrt{2}} |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle_{m+1,n} + \sqrt{1 - \beta^2} |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle_{m+1,n} \right) \dots, \\ & s_{m,n,1}^z s_{m+1,n,2}^z | \Psi_{\text{var}} \rangle \\ &= \dots - \frac{1}{4} \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)_{m,n} + \sqrt{1 - \beta^2} |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle_{m,n} \right] \\ &\left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle + |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)_{m+1,n} + \sqrt{1 - \beta^2} |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle_{m+1,n} \right] \dots, \end{aligned} \quad (2.21)$$

$$\langle \Psi_{\text{var}} | \mathbf{s}_{m,n,1} \cdot \mathbf{s}_{m+1,n,2} | \Psi_{\text{var}} \rangle = \frac{1}{2}\beta^2(1 - \beta^2) - \frac{1}{4}(1 - \beta^2)^2. \quad (2.22)$$

Беручи до уваги обчислені середні значення (2.18), (2.20) і (2.22), можна записати вираз для варіаційної енергії $E(\beta)$:

$$\frac{E(\beta)}{\mathcal{N}} = \left(\frac{1}{4} - \beta^2 \right) J_2 - 2\beta^2(1 - \beta^2)(J_1 - J_X) - (1 - \beta^2)^2(J_1 + J_X). \quad (2.23)$$

Із $d(E(\beta)/\mathcal{N})/d\beta = 0$ одержуємо рівняння на варіаційний параметр β :

$$\beta(J_2 - 4J_X - 2(J_1 - 3J_X)\beta^2) = 0. \quad (2.24)$$

Це рівняння має такі розв'язки:

$$\begin{aligned} & \beta_1 = 0, \\ & \beta_{2,3} = \pm \sqrt{\frac{J_2 - 4J_X}{2(J_1 - 3J_X)}}. \end{aligned} \quad (2.25)$$

Варіаційна енергія $E(\beta)$ стає найнижчою при $\beta_1 = 0$ і $\beta_2 = 1$, тобто на кінцях

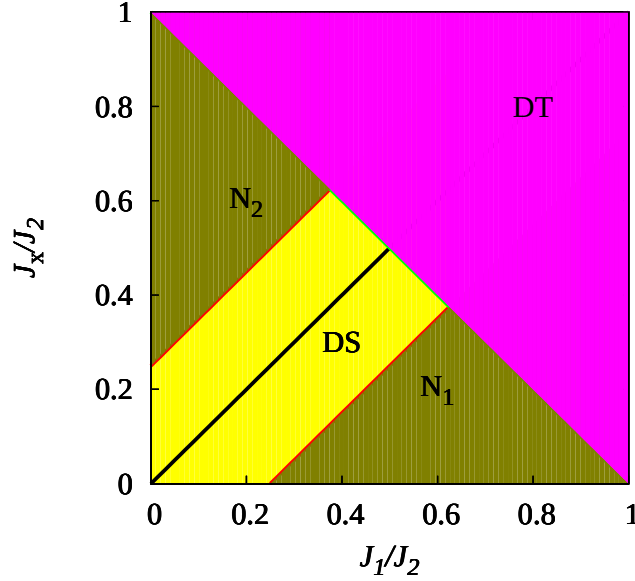


Рис. 2.5. Фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах J_1/J_2 – J_x/J_2 . Червоні критичні лінії відділяють синглет-димерну фазу (DS , жовта область) від антиферомагнітних фаз (N_1 і N_2 , оливкові області). Зелена критична лінія обмежує DS , N_1 і N_2 фази й відділяє їх від нової антиферомагнітної фази (димер-триплетної, DT , фіолетова область). Структура димер-триплетної фази представлена на рисунку 2.7.

діапазону $0 \leq \beta \leq 1$:

$$\beta = \begin{cases} 0, & J_2 \leq J_1 + J_x, \\ 1, & J_2 \geq J_1 + J_x. \end{cases} \quad (2.26)$$

Енергія основного стану розрахована на один димер матиме вигляд:

$$\frac{E_0}{\mathcal{N}} = \begin{cases} \frac{J_2}{4} - (J_1 + J_x), & J_2 \leq J_1 + J_x, \\ -\frac{3J_2}{4}, & J_2 \geq J_1 + J_x. \end{cases} \quad (2.27)$$

Порівнюючи отримані енергії в різних областях фазової діаграми, отримуємо третю магнітну фазу (DT , див. рис. 2.5 і 2.6), структура якої відрізняється від двох інших (див. рис. 2.7).

Проте, фазові діаграми представлені на рисунках 2.5 і 2.6 ще не є завершеними. Щоб отримати правильну картину фазових діаграм, потрібно уточнити межі між фазами DT і N_1 та DT і N_2 . Для цього треба здійснити порівняння енергій

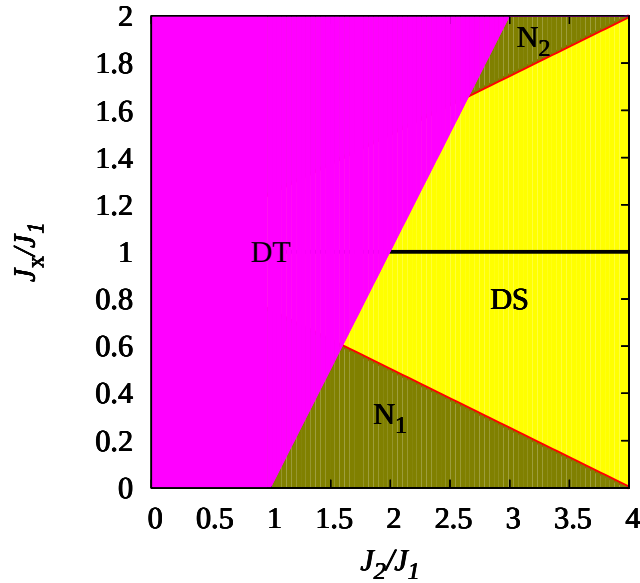


Рис. 2.6. Фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах $J_2/J_1 - J_x/J_1$. Червоні критичні лінії відділяють синглет-димерну фазу (DS , жовта область) від антиферромагнітних фаз (N_1 і N_2 , оливкові області). Зелена критична лінія обмежує DS , N_1 і N_2 фази й відділяє їх від нової антиферромагнітної фази (димер-триплетної, DT , фіолетова область).

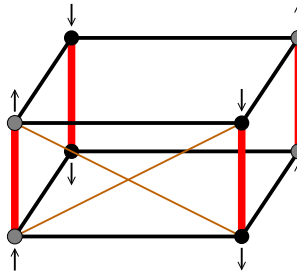


Рис. 2.7. Структура димер-триплетної фази.

триплетного стану ($\beta = 0$) та станів Нееля ($\alpha < 1$). Таке порівняння енергій із різних режимів дає нам точні (в даному підході) криві меж між цими фазами:

$$\begin{aligned} 4J_1 + \frac{J_2^2}{8(J_1 - J_x)} &= J_2, \\ 4J_x + \frac{J_2^2}{8(J_x - J_1)} &= J_2. \end{aligned} \quad (2.28)$$

Використовуючи рівняння (2.28), можемо побудувати остаточні фазові діаграми основного стану для квадратної двошарової ґратки (див. рис. 2.8, 2.9).

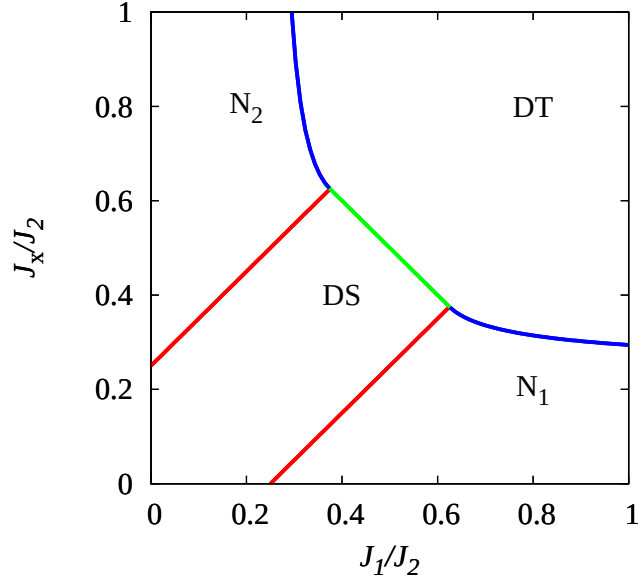


Рис. 2.8. Повна фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах J_1/J_2 – J_x/J_2 . Сині криві відображають уточнені межі між DT фазою та N_1 і N_2 фазами.

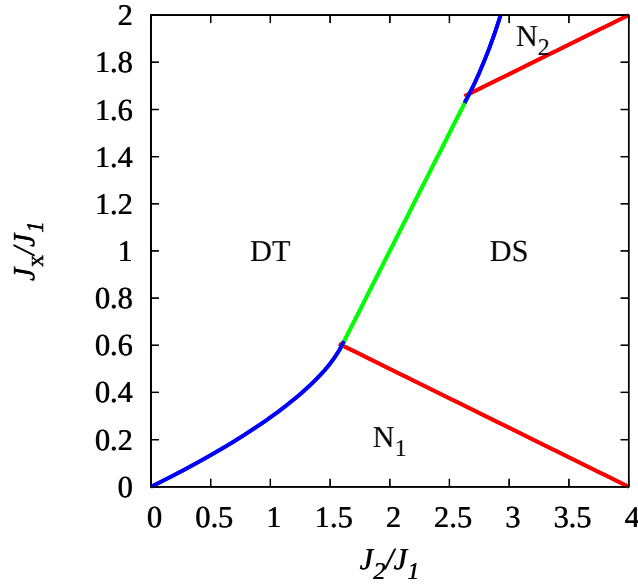


Рис. 2.9. Повна фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах J_2/J_1 – J_x/J_1 . Сині криві відображають уточнені межі між DT фазою та N_1 і N_2 фазами.

Фазова діаграма зображена на рисунку 2.9 може бути порівняна з результатами одержаними в роботі [67] (див. рис. 1.20). Для $J_x = 0$ (нефрустрована

квадратна двошарова ґратка) перехід між фазами DS і N_1 відбувається при $J_2/J_1 = 4$ (див. рис. 2.9). В роботі [67] це відношення дорівнює значенню 2.5220(1). У випадку $J_X = J_1$ (повністю фрустрована квадратна двошарова ґратка) перехід між фазами DS і DT відбувається при $J_2/J_1 = 2$ (див. рис. 2.9). У роботі [67] це відношення рівне значенню 2.3279(1). Також можна порівняти координати однієї з двох потрійних точок, у яких перетинаються три криві фазових переходів (червона, синя і зелена; див. рис. 2.9). Точка, в якій сходяться DS , N_1 і DT фази визначається координатами: $J_2 = 1.6J_1$ і $J_X = 0.6J_1$. В роботі [67] ця точка представлена координатами: $J_2 = 1.638(15)J_1$ і $J_X = 0.520(5)J_1$. Бачимо, що простий варіаційний підхід забезпечує хорошу узгодженість із результатами, отриманими за допомогою набагато складніших методів.

2.2. Шестикутна двошарова ґратка

Шестикутна двошарова ґратка є двопідґратковою, так як і квадратна, й відмінність полягає тільки в числі найближчих сусідів для окремо вибраного димера. В такому випадку, проробивши такі ж обчислення, що й у попередньому підрозділі, отримаємо вирази для варіаційної енергії та умови розділу фаз, які якісно не відрізняються від випадку квадратної двошарової ґратки. Відмінності будуть тільки кількісні. Тому, щоб не повторювати обчислення, скористаємося вже розрахованими середніми значеннями (2.6), (2.8), (2.10) (2.18), (2.20) і (2.22) для одержання виразів для варіаційної енергії.

2.2.1. Область $J_1 \gg J_X$

Для шестикутної двошарової ґратки (див. рис. 2.10) у випадку, коли $J_1 \gg J_X$, скориставшись середніми значеннями (2.6), (2.8) і (2.10) та врахувавши кількість найближчих сусідів для димера, отримаємо вираз для варіаційної енергії:

$$\frac{E(\alpha)}{\mathcal{N}} = - \left(\frac{\alpha}{1 + \alpha^2} + \frac{1}{4} \right) J_2 + \frac{3}{4} \left(\frac{1 - \alpha^2}{1 + \alpha^2} \right)^2 (J_1 - J_X). \quad (2.29)$$

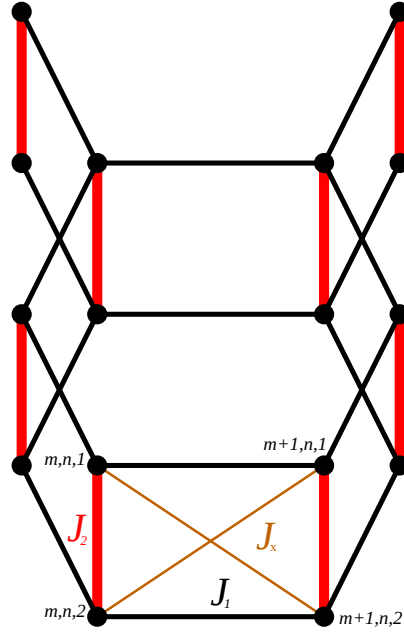


Рис. 2.10. Елемент шестикутної двошарової ґратки. Цілі числа m і n визначають розташування вузла у шарі, а числа 1 і 2 позначають номер шару. Вертикальні димерні (червоні) зв'язки мають константу взаємодії J_2 . Внутрішньшарові (чорні) зв'язки між найближчими сусідами мають константу взаємодії J_1 . Фрустровані міжшарові (коричневі) зв'язки мають константу J_X .

З умови на екстремум функції $d(E(\alpha)/\mathcal{N})/d\alpha = 0$ отримуємо рівняння:

$$(\alpha^2 - 1)(J_2\alpha^2 + J_2 + 6\alpha J_1 - 6\alpha J_X) = 0. \quad (2.30)$$

З рівняння (2.30) одержуємо значення варіаційного параметра α , при якому енергія $E(\alpha)$ набуває мінімальних значень:

$$\alpha = \begin{cases} \frac{3}{J_2}(J_X - J_1) - \sqrt{\frac{9}{J_2^2}(J_1 - J_X)^2 - 1}, & J_2 \leq 3(J_1 - J_X), \\ 1, & J_2 \geq 3(J_1 - J_X). \end{cases} \quad (2.31)$$

Енергія основного стану (обчислена на один димер) визначатиметься в такий спосіб:

$$\frac{E_0}{\mathcal{N}} = \begin{cases} \frac{J_2}{4} + \frac{3(J_1 - J_X)}{4} \left(1 - \frac{J_2}{3(J_1 - J_X)}\right)^2, & J_2 \leq 3(J_1 - J_X), \\ -\frac{3J_2}{4}, & J_2 \geq 3(J_1 - J_X). \end{cases} \quad (2.32)$$

На рисунках 2.11 і 2.12 представлені фазові діаграми для шестикутної двошарової ґратки, отримані в області $J_1 \gg J_X$ ($J_1 \ll J_X$). Бачимо, що якісно ці

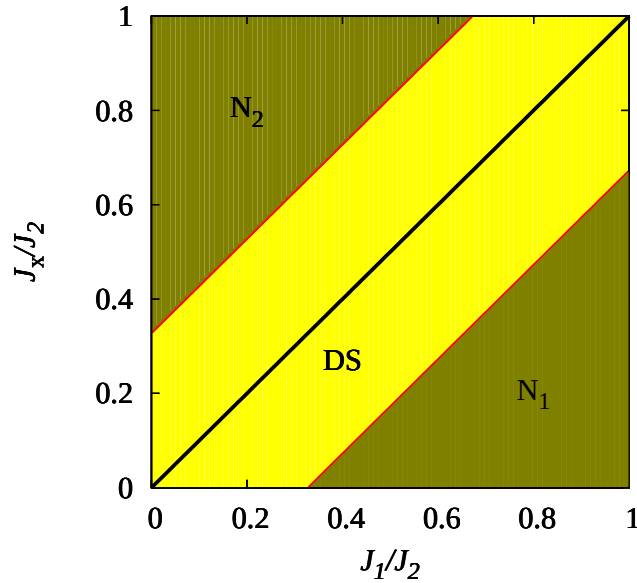


Рис. 2.11. Фазова діаграма основного стану для шестикутної двошарової ґратки в координатах J_1/J_2 – J_x/J_2 . Червоні критичні лінії відділяють димер-синглетну фазу (DS , жовта область) від фаз із антиферомагнітним порядком (N_1 і N_2 , оливкові області). Чорна лінія позначає граничний випадок повної фрустрації $J_x = J_1$. Структура фаз представлена на рисунку 2.4.

фазові діаграми не відрізняються від діаграм для квадратної двошарової ґратки (див. рис. 2.2 і 2.3). Щоб отримати повну фазову діаграму, перейдемо до вивчення області порівняних міждимерних взаємодій J_1 і J_x .

2.2.2. Область $J_1 \approx J_x$

Щоб записати вираз для варіаційної енергії, коли J_1 і J_x є приблизно однаковими, тобто $J_1 \approx J_x$, скористаємося середніми значеннями (2.18), (2.20) і (2.22):

$$\frac{E(\beta)}{\mathcal{N}} = \left(\frac{1}{4} - \beta^2\right) J_2 - \frac{3}{2}\beta^2(1 - \beta^2)(J_1 - J_x) - \frac{3}{4}(1 - \beta^2)^2(J_1 + J_x). \quad (2.33)$$

Розв'язуючи рівняння на екстремум $d(E(\beta)/\mathcal{N})/d\beta = 0$, виявляємо, що варіаційна енергія досягає мінімальних значень на кінцях діапазону варіаційного параме-

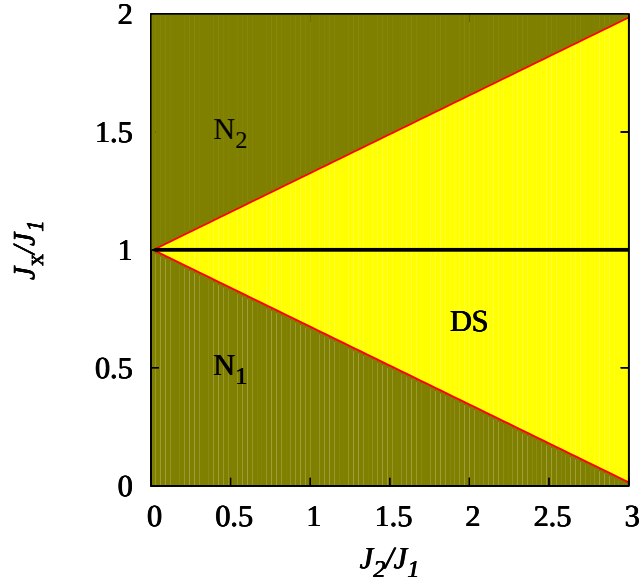


Рис. 2.12. Фазова діаграма основного стану для шестикутної двошарової ґратки в координатах $J_2/J_1 - J_x/J_1$. Червоні критичні лінії відділяють димер-синглетну фазу (DS , жовта область) від фаз із антиферромагнітним порядком (N_1 і N_2 , оливкові області). Чорна лінія позначає граничний випадок повної фрустрації $J_x = J_1$.

тра $0 \leq \beta \leq 1$:

$$\beta = \begin{cases} 0, & J_2 \leq \frac{3}{4}(J_1 + J_x), \\ 1, & J_2 \geq \frac{3}{4}(J_1 + J_x). \end{cases} \quad (2.34)$$

В свою чергу, енергія основного стану (розрахована на один димер) матиме вигляд:

$$\frac{E_0}{\mathcal{N}} = \begin{cases} \frac{J_2}{4} - \frac{3}{4}(J_1 + J_x), & J_2 \leq \frac{3}{4}(J_1 + J_x), \\ -\frac{3J_2}{4}, & J_2 \geq \frac{3}{4}(J_1 + J_x). \end{cases} \quad (2.35)$$

Порівняння енергії (2.35) в областях із різним співвідношенням між взаємодіями J_2 , J_1 і J_x дає уточнені фазові діаграми (див. рис. 2.13 і 2.14), які є якісно подібні до фазових діаграм для квадратної двошарової ґратки (див. рис. 2.5 і 2.6).

Далі, зіставляємо енергії триплетного стану ($\beta = 0$) та станів Нееля ($\alpha < 1$) отримані в різних областях на лініях розмежування фаз DT і N_1 та DT і N_2 . Одержуємо рівняння кривих, які дозволяють нам побудувати повні фазові

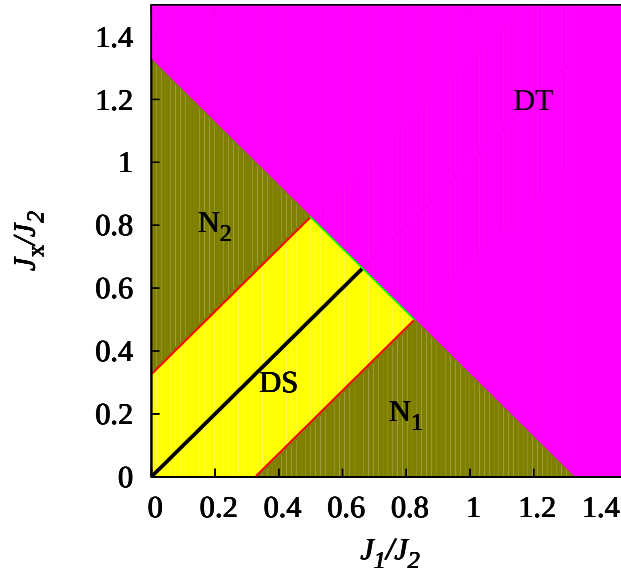


Рис. 2.13. Фазова діаграма основного стану для шестикутної двошарової ґратки в координатах $J_1/J_2 - J_x/J_2$. Червоні критичні лінії відділяють синглет-димерну фазу (DS , жовта область) від антиферромагнітних фаз (N_1 і N_2 , оливкові області). Зелена критична лінія обмежує DS , N_1 і N_2 фази й відділяє їх від нової антиферромагнітної (димер-триплетної, DT) фази (фіолетова область). Структура димер-триплетної фази представлена на рисунку 2.7.

діаграми основного стану в різних координатах (див. рис. 2.15 і 2.16):

$$\begin{aligned} 3J_1 + \frac{J_2^2}{6(J_1 - J_x)} &= J_2, \\ 3J_x + \frac{J_2^2}{6(J_x - J_1)} &= J_2. \end{aligned} \quad (2.36)$$

Фазову діаграму для шестикутної двошарової ґратки, зображену на рисунку 2.15, можна порівняти з фазовою діаграмою отриманою в роботі [62] (див. рис. 1.11) за допомогою різних аналітичних і числових методів. Для критичної точки на лінії повної фрустрації $J_x = J_1$ у [62] маємо: $(J_1/J_2)_c^{SB-MFT} = 0.547$ і $(J_1/J_2)_c^{LSWT} = 0.551$. Наші обчислення дають передбачення: $(J_1/J_2)_c = 2/3 \approx 0.667$. Для координат квантових потрійних точок маємо: $J_1/J_2 = 1/2 = 0.5$, $J_x/J_2 = 5/6 = 0.833 \dots$ і $J_1/J_2 = 5/6 = 0.833 \dots$, $J_x/J_2 = 1/2 = 0.5$.

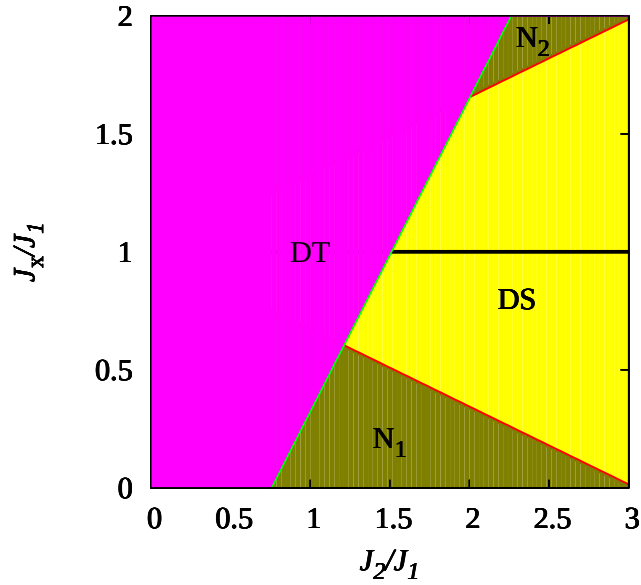


Рис. 2.14. Фазова діаграма основного стану для шестикутної двошарової ґратки в координатах J_2/J_1 – J_x/J_1 . Червоні критичні лінії відділяють синглет-димерну фазу (DS , жовта область) від антиферромагнітних фаз (N_1 і N_2 , оливкові області). Зелена критична лінія обмежує DS , N_1 і N_2 фази й відділяє їх від нової антиферромагнітної (димер-триплетної, DT) фази (фіолетова область).

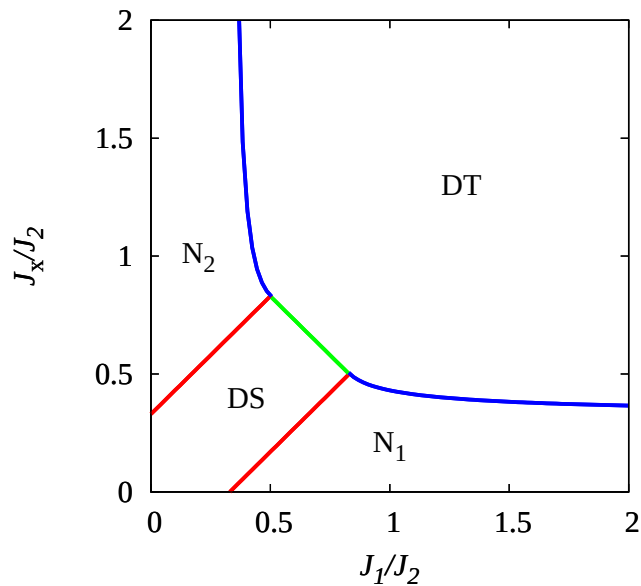


Рис. 2.15. Повна фазова діаграма основного стану для шестикутної двошарової ґратки в координатах J_1/J_2 – J_x/J_2 . Сині криві відображають уточнені межі між DT фазою та N_1 і N_2 фазами.

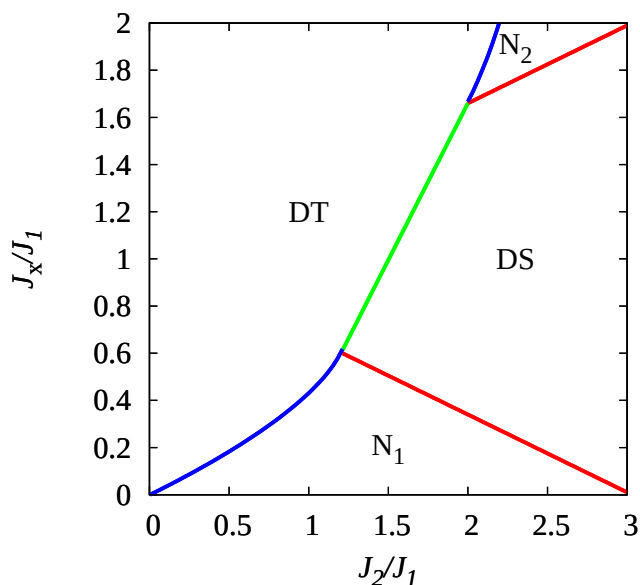


Рис. 2.16. Повна фазова діаграма основного стану для шестикутної двошарової ґратки в координатах J_2/J_1 – J_x/J_1 . Сині криві відображають уточнені межі між DT фазою та N_1 і N_2 фазами.

2.3. Висновки

У цьому розділі представлено дослідження фазових діаграм основного стану для квантових антиферромагнетиків Гайзенберга на квадратній та шестикутній двошарових ґратках за відсутності магнітного поля. Побудова фазових діаграм здійснена на основі порівняння варіаційних енергій різних станів, одержаних із використанням пробних варіаційних хвильових функцій. Отримані фазові діаграми якісно відтворюють результати, одержані за допомогою складніших підходів, і навіть непогано кількісно узгоджуються для деяких характерних точок фазової діаграми. Результати цього розділу опубліковані в препринті [24].

РОЗДІЛ 3

ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ У СИЛЬНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ: РЕАЛІЗАЦІЯ ПЛОСКОЗОННОЇ ФІЗИКИ У СИЛЬНО ФРУСТРОВАНОМУ КВАНТОВОМУ МАГНЕТИКУ

Пошук твердотільних реалізацій плоскостонних систем має вирішальне значення для підтвердження або заперечення вже зроблених теоретичних передбачень для цих квантових взаємодіючих багаточастинкових систем. Для фрустрованих квантових магнетиків одномагнетонні плоскі зони приводять до різноманітних незвичайних властивостей, пов'язаних із існуванням локалізованих багатомангнетонних станів. Нещодавно синтезована магнітна сполука $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [19] виглядає майже ідеальним кандидатом для виявлення цих особливостей на експериментах.

У цьому розділі розроблена теорія для сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Для цього ми пристосуємо до цієї сполуки загальну концепцію локалізованих магнетонів [5, 80]. Перш за все, ми показуємо, що запропонована нами теорія описує відомі експериментальні факти. Далі, ми пропонуємо нові експериментальні дослідження для виявлення фазового переходу, пов'язаного з впорядкуванням локалізованих магнетонів при низьких температурах. Матеріал цього розділу опубліковано в статті [23].

3.1. Експерименти для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ і спінова модель

У цьому розділі обговоримо низькотемпературне впорядкування у $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ за наявності магнітного поля, в основі якого лежить картина лока-

лізованих магнонів для фрустрованої двошарової моделі [16, 17]. Використовуючи цю теорію, ми опишемо експериментальні криві намагніченості, знайдені в статті [19], і запропонуємо нові експерименти для виявлення специфічних властивостей, зумовлених локалізованими магнонами, таких як додаткова низькотемпературна сингулярність у теплоємності та фазовий перехід лад-безлад, яким можна керувати за допомогою магнітного поля. Хоч у попередніх роботах [17, 81] вивчалися XXX моделі, сценарій локалізованих магнонів також зберігається і для XXZ моделей із магнітним полем, прикладеним вздовж осі z [5, 80, 82, 83]. Але випадок, коли доданок Зеємана не комутує з XXZ взаємодіями (наприклад, коли магнітне поле прикладене вздовж напрямку x), досі не розглядався.

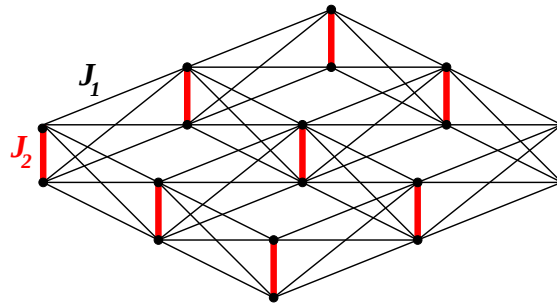


Рис. 3.1. Фрустрована квадратна двошарова ґратка. Червоні зв'язки позначають внутрішньодимерні взаємодії J_2 , чорні зв'язки позначають міждимерні взаємодії J_1 .

Розгляньмо анізотропну спін-1/2 XXZ антиферромагнітну квадратну двошарову ґратку з $N = 2\mathcal{N}$ вузлами (див. рис. 3.1) і, маючи на увазі експерименти зі статті [19], введемо різні значення g -фактора для поля, прикладеного вздовж осей x і z . Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta_{ij} s_i^z s_j^z) - \sum_{i=1}^N \mathbf{h} \cdot \mathbf{s}_i. \quad (3.1)$$

Тут J_{ij} і Δ_{ij} набувають або значень J_2 і Δ_2 (вертикальні димерні зв'язки), або J_1 і Δ_1 (міждимерні зв'язки) (див. рис. 3.1). Потрібно зауважити, що рівність всіх міждимерних зв'язків відповідає ідеальній плоскостонній геометрії. Окрім того, щоб проявилася фізика локалізованих магнонів, потрібне достатньо велике значення

J_2 (наприклад, $J_2 > 4J_1$ для $\Delta_1 = \Delta_2 = 1$ [16, 17]). Відповідно до [19], розгляньмо дві різні орієнтації магнітного поля $\mathbf{h} = (0, 0, h^z)$ і $\mathbf{h} = (h^x, 0, 0)$, а також два різні g -фактори g^z і g^x , тобто, $h^z = g^z \mu_B \mathbf{H}$ і $h^x = g^x \mu_B \mathbf{H}$, де $\mu_B \approx 0.67171$ К/Т є магнетон Бора і $\mathbf{H}$ є значення (виміряне в теслах) прикладеного магнітного поля. Згідно з [19], g -фактори для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ є такими: $g^z = 2.0 \pm 0.1$ і $g^x = 3.86$.

У статті Танаки та ін. [19] показано, що описана спінова модель реалізується у кристалі $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Розробимо ефективну низькотемпературну теорію для моделі (3.1) у сильних магнітних полях, застосовуючи підхід сильного зв'язку для обох випадків орієнтації магнітного поля і теорію збурень. Для цього припустимо, що основна частина гамільтоніана H_{main} складається тільки з вертикальних зв'язків J_2 і доданка Зеємана при магнітному полі h_0 , при якому два власні стани $|u\rangle$ і $|d\rangle$ спінового димера є виродженими (мають однакову енергію). Отже, при h_0 має місце стрибок намагніченості до насичення (до майже насичення) для поля вздовж осі z (x). Доданки, що залишилися в (3.1), розглядаються як збурення $V = H - H_{\text{main}}$. Ефективний гамільтоніан отримується за допомогою стандартної теорії збурення [84–86]:

$$H_{\text{eff}} = P H P + \dots \quad (3.2)$$

Тут виписано лише перший доданок у ряді операторної теорії збурень, див. (4.21), а $P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$ — проектор на множину основних станів H_{main} , що складається з $2^{\mathcal{N}}$ станів $\mathcal{N}$ димерів. Введемо також псевдоспінові оператори $T^z = (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|)/2$, $T^+ = |u\rangle\langle d|$, $T^- = |d\rangle\langle u|$ на кожному вертикальному димерному зв'язку, щоб представити H_{eff} у зручній і впізнаваній формі. В результаті обчислень подібних до тих, що описані детально у підрозділі 4.3.2, прийдемо до такого ефективного гамільтоніана:

$$H_{\text{eff}} = \mathbf{C} - \mathbf{h} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \mathbf{J} \sum_{\langle mn \rangle} T_m^z T_n^z \quad (3.3)$$

(див. нижче підрозділи 3.2 і 3.3). Така форма гамільтоніана відповідає спін-1/2 антиферромагнітній моделі Ізинга на квадратній ґратці. Параметри $\mathbf{C}$, $\mathbf{h}$ і $\mathbf{J}$ є функціями параметрів гамільтоніана J_2 , Δ_2 , J_1 , Δ_1 , і h . Приведемо деталі виведення

рівняння (3.3). Розглянемо окремо випадок поля вздовж осі z і випадок поля вздовж осі x .

3.2. Ефективна модель у магнітному полі вздовж осі z

Розгляньмо дещо загальнішу модель (3.1), в якій J_{ij} , Δ_{ij} набуває або значення J_2 , Δ_2 (димерні зв'язки), або J_{11} , Δ_{11} , J_{12} , Δ_{12} , J_{21} , Δ_{21} , J_{22} , Δ_{22} (всі інші зв'язки) (див. рис. 3.2). Тепер співвідношення $J_{11} = J_{12} = J_{21} = J_{22} = J_1$ і

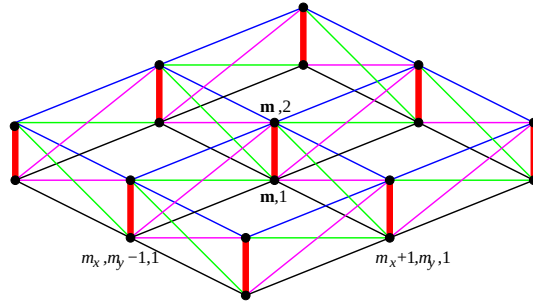


Рис. 3.2. Фрустрована квадратна двошарова ґратка. Вузли пронумеровані індексом комірки m_x, m_y , а індекс вузла в комірці є $i = 1, 2$. Обмінна взаємодія для вертикальних зв'язків (товсті червоні зв'язки) є J_2 , в той час як обмінна взаємодія для зв'язка, який з'єднує вузли m_x, m_y, i і $m_x + 1, m_y, j$ чи вузли m_x, m_y, i і $m_x, m_y + 1, j$ (тонкі зв'язки) є J_{ij} .

$\Delta_{11} = \Delta_{12} = \Delta_{21} = \Delta_{22} = \Delta_1$ відповідатиме важливому граничному випадку ідеальної фрустрації для ізотропної моделі Гайзенберга, яка розглядалася в [16, 17] для $\Delta_2 = \Delta_1 = 1$. Експеримент [19] не дозволяє відрізнити взаємодії J_{11} , J_{12} , J_{21} , J_{22} . Вважається, що вони однакові й визначаються як $4J_1 = 27.3$ К, а внутрішньодимерна взаємодія визначається як $J_2 = 110$ К. Тут важливою відмінністю від попередніх досліджень [16, 17] є наявність анізотропії обмінної взаємодії, що контролюється параметром $0 \leq \Delta_{ij} \leq 1$ ($\Delta_2 = 0.149$ і $\Delta_1 = 0.56$ — значення, які відповідають сполуці $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [19]). Зовнішнє магнітне поле $\mathbf{h} = (h^x, h^y, h^z)$ може мати, в принципі, довільну орієнтацію. Проте, згідно [19] розглядатимемо тільки два окремі випадки: поле вздовж осі z (цей підрозділ) і поле вздовж осі x (наступний підрозділ).

Розпочнемо з випадку, коли поле прикладене вздовж осі z . Тоді гамільтоніан (3.1) перепишемо так:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta_{ij} s_i^z s_j^z) - h^z \sum_{i=1}^N s_i^z. \quad (3.4)$$

Істотними далі є два стани на кожному димері: $|u\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ і $|d\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ з відповідними енергіями $\varepsilon_u = \Delta_2 J_2/4 - h$ і $\varepsilon_d = -(2 + \Delta_2) J_2/4$. Енергія цих двох станів однакова при $h_0 = (1 + \Delta_2) J_2/2$. Після нескладних, проте громіздких, обчислень матимемо такі вирази для $PH_{\text{main}}P$ і PVP :

$$\begin{aligned} PH_{\text{main}}P &= \mathcal{N} \left(-\frac{J_2}{4} - \frac{h_0}{2} \right) - \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(h_0 - \frac{1 + \Delta_2}{2} J_2 \right) T_m^z, \\ PVP &= \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{J}{2} + 2JT_m^z \right) + \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(-\frac{h}{2} + \frac{h_0}{2} - (h - h_0)T_m^z \right) \\ &\quad + \sum_{\langle mn \rangle} (JT_m^z T_n^z + J_{XY}(T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y)). \end{aligned} \quad (3.5)$$

Об'єднуючи ці два вирази, одержуємо співвідношення для ефективного гамільтоніана H_{eff} :

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{J}{2} \right) \mathcal{N} - \mathbf{h} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z \\ &\quad + \sum_{\langle mn \rangle} [JT_m^z T_n^z + J_{XY}(T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y)]. \end{aligned} \quad (3.6)$$

Тут параметри ефективного гамільтоніана (3.6) визначаються таким чином:

$$\begin{aligned} J &= \frac{\Delta_{11}J_{11} + \Delta_{12}J_{12} + \Delta_{21}J_{21} + \Delta_{22}J_{22}}{4}, \\ \mathbf{h} &= h - h_1, \quad h_1 = \frac{1 + \Delta_2}{2} J_2 + 2J, \\ J_{XY} &= \frac{J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22}}{2}. \end{aligned} \quad (3.7)$$

Очевидно, що таким чином отримано спін-1/2 XXZ модель Гайзенберга на квадратній ґратці в зовнішньому магнітному полі, прикладеному вздовж осі z .

Ця спінова модель є вільною від фрустрації і може бути вивчена, до прикладу, з застосуванням методу квантового Монте Карло.

Але якщо вважати, що $J_{11} = J_{12} = J_{21} = J_{22} = J_1$, то результат стає значно простішим: рівняння (3.6), (3.7) відповідають спін-1/2 антиферромагнітній моделі Ізинга на квадратній ґратці в зовнішньому полі,

$$H_{\text{eff}} = \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{J}{2} \right) \mathcal{N} - \left(h - \frac{1 + \Delta_2}{2} J_2 - 2J \right) \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + J \sum_{\langle mn \rangle} T_m^z T_n^z, \\ J = \frac{\Delta_{11} + \Delta_{12} + \Delta_{21} + \Delta_{22}}{4} J_1. \quad (3.8)$$

Одержаний результат узгоджується з попередніми [17]. Справді, рівняння (3.8) при $\Delta_2 = \Delta_{11} = \dots = \Delta_{22} = 1$ переходить у модель класичного ґраткового газу зі скінченним відштовхуванням; така модель задана в рівнянні (6.7) у статті [17], де ефективна модель ґраткового газу була отримана шляхом інших міркувань (без застосування наближення сильного зв'язку й операторної теорії збурень).

3.3. Ефективна модель у магнітному полі вздовж осі x

Розглянемо далі випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі x . В цьому випадку зручно повернути спінові осі і записати гамільтоніан (3.1) у нових координатах. Виконаємо поворот осей у спіновому просторі навколо осі y на кут $\pi/2$. Тоді гамільтоніан набуває вигляду:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} [s_i^z s_j^z + s_i^y s_j^y + \Delta_{ij} s_i^x s_j^x] - h^x \sum_{i=1}^N s_i^z. \quad (3.9)$$

Вираз для гамільтоніана (3.9) можна записати і в такій формі:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} [\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + (\Delta_{ij} - 1) s_i^x s_j^x] - h^x \sum_{i=1}^N s_i^z. \quad (3.10)$$

У загальному випадку концепція локалізованих магнонів може бути введена у випадку, коли z -компонента сумарного спіну комутує з гамільтоніаном [так

як для гамільтоніана (3.4)]: тоді власні стани гамільтоніана можуть бути вивчені в підпросторах із різними значеннями $S^z = \sum_{i=1}^N s_i^z$ окремо. Проте, навіть для гамільтоніана (3.10), стан "кристал локалізованих магнонів" (але не основний стан у границі дуже сильного поля) залишається точним власним станом гамільтоніана (3.10). Для теорії збурень, якою ми тут користуємося, комутування z -компоненти сумарного спіну з гамільтоніаном не використовується.

Для випадку поля, прикладеного вздовж осі x , двома істотними для сильних полів станами на кожному димері будуть $|d\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ з енергією $\varepsilon_d = -(2 + \Delta_2)J_2/4$ та $|u\rangle = a|\uparrow\uparrow\rangle + b|\downarrow\downarrow\rangle$ із коефіцієнтами a і b й енергією ε_u , які ще треба знайти. Щоб знайти невідомі коефіцієнти a і b та енергію ε_u , потрібно розв'язати систему рівнянь для власних станів двох спінів із гамільтоніаном $J_2(\mathbf{s}_1\mathbf{s}_2 + (\Delta_2 - 1)s_1^x s_2^x) - h(s_1^z + s_2^z)$, взявши $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\downarrow\uparrow\rangle$ і $|\downarrow\downarrow\rangle$ за базис. Система рівнянь для невідомих коефіцієнтів C_1 , C_2 , C_3 і C_4 у розкладі власного стану двоспінового гамільтоніана за базисними станами матиме вигляд:

$$\begin{pmatrix} \frac{J_2}{4} - h - \varepsilon & 0 & 0 & \frac{J_2(\Delta_2-1)}{4} \\ 0 & -\frac{J_2}{4} - \varepsilon & \frac{J_2}{2} + \frac{J_2(\Delta_2-1)}{4} & 0 \\ 0 & \frac{J_2}{2} + \frac{J_2(\Delta_2-1)}{4} & -\frac{J_2}{4} - \varepsilon & 0 \\ \frac{J_2(\Delta_2-1)}{4} & 0 & 0 & \frac{J_2}{4} - h - \varepsilon \end{pmatrix} \begin{pmatrix} C_1 \\ C_2 \\ C_3 \\ C_4 \end{pmatrix} = 0. \quad (3.11)$$

Оскільки така система розбивається на дві підсистеми і нас цікавлять тільки невідомі коефіцієнти C_1 і C_4 , то маємо справу з такою системою рівнянь:

$$\begin{cases} \left(\frac{J_2}{4} - h - \varepsilon\right) C_1 + \frac{J_2(\Delta_2 - 1)}{4} C_4 = 0, \\ \frac{J_2(\Delta_2 - 1)}{4} C_1 + \left(\frac{J_2}{4} - h - \varepsilon\right) C_4 = 0. \end{cases} \quad (3.12)$$

Із характеристичного рівняння, яке забезпечує нетривіальність розв'язків системи (3.12), матимемо:

$$\varepsilon_{1,4} = \frac{1}{4} \left[J_2 \mp \sqrt{J_2^2(\Delta_2 - 1)^2 + 16h^2} \right]. \quad (3.13)$$

Оскільки, розглядається випадок $\Delta_2 < 1$, то вираз для шуканої енергії, який даватиме найнижче значення енергії, матиме вигляд:

$$\varepsilon_u = \varepsilon_1 = \frac{1}{4} \left[J_2 - \sqrt{J_2^2(1 - \Delta_2)^2 + 16h^2} \right]. \quad (3.14)$$

Тепер легко знайти невідомі коефіцієнти a та b :

$$\begin{aligned} a &= C_1 = \frac{h + A}{C}, \\ b &= C_4 = \frac{(1 - \Delta_2)J_2}{4C}, \end{aligned} \quad (3.15)$$

де $C = \sqrt{2A(A + h)}$, $A = \sqrt{\frac{(1 - \Delta_2)^2 J_2^2}{16} + h^2}$.

На відміну від випадку, коли поле прикладене вздовж осі z , множина основних станів $|\varphi_0\rangle$ містить залежні від поля стани $|u\rangle$. Тому для $PH_{\text{main}}P$ матимемо співвідношення:

$$\begin{aligned} & PH_{\text{main}}P \\ &= P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left[\left(\frac{J_2}{4} + \frac{(\Delta_2 - 1)J_2}{2} ab - h(a^2 - b^2) \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \right. \\ & \quad \left. - \frac{(2 + \Delta_2)J_2}{4} \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) \right] P \\ &= -\frac{1}{2} \left(A + \frac{(1 + \Delta_2)J_2}{4} \right) \mathcal{N} + \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{(3 + \Delta_2)J_2}{4} - A \right) T_m^z. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Для PVP одержуємо такий вираз:

$$PVP = \frac{\mathcal{J}}{2} \mathcal{N} + 2\mathcal{J} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \sum_{\langle mn \rangle} (\mathcal{J}^x T_m^x T_n^x + \mathcal{J}^y T_m^y T_n^y + \mathcal{J} T_m^z T_n^z). \quad (3.17)$$

Об'єднуючи (3.16) і (3.17), отримуємо H_{eff} у такому вигляді:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \frac{1}{2} \left(\mathcal{J} - A - \frac{(1 + \Delta_2)J_2}{4} \right) \mathcal{N} - \hbar \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z \\ & \quad + \sum_{\langle mn \rangle} (\mathcal{J}^x T_m^x T_n^x + \mathcal{J}^y T_m^y T_n^y + \mathcal{J} T_m^z T_n^z). \end{aligned} \quad (3.18)$$

Параметри ефективного гамільтоніана (3.18) визначаються так:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}^x &= (J_{11}\Delta_{11} - J_{12}\Delta_{12} - J_{21}\Delta_{21} + J_{22}\Delta_{22}) \frac{(a - b)^2}{2}, \\ \mathcal{J}^y &= (J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22}) \frac{(a + b)^2}{2}, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} J &= (J_{11} + J_{12} + J_{21} + J_{22}) \frac{(a^2 - b^2)^2}{4}, \\ h &= -2J - \frac{(3 + \Delta_2)J_2}{4} + A. \end{aligned} \quad (3.19)$$

Зауважимо, що $(a^2 - b^2)^2 = h^2/A^2$.

Таким чином, H_{eff} (3.18) представляє спін-1/2 XYZ модель Гайзенберга на квадратній ґратці з полем, прикладеним вздовж осі z . У випадку, коли міждимерні взаємодії нерозрізненні, тобто, $J_{11} = J_{12} = J_{21} = J_{22} = J_1$ і $\Delta_{11} = \Delta_{12} = \Delta_{21} = \Delta_{22} = \Delta_1$, отримуємо важливе спрощення: $J = (a^2 - b^2)^2 J_1$, $J^x = J^y = 0$, і рівняння (3.18), (3.19) переходять у гамільтоніан спін-1/2 антиферромагнітної моделі Ізинга на квадратній ґратці в зовнішньому полі:

$$H_{\text{eff}} = \frac{1}{2} \left(J - A - \frac{(1 + \Delta_2)J_2}{4} \right) \mathcal{N} - h \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \sum_{\langle mn \rangle} J T_m^z T_n^z. \quad (3.20)$$

Якщо додатково покласти $\Delta_2 = 1$, то матимемо $a = 1$, $b = 0$, $h = h - J_2$, $J = J_1$ і рівняння (3.20) перетворюється в (3.8) при $\Delta_2 = \Delta_{11} = \dots = \Delta_{22} = 1$.

3.4. Пояснення наявних експериментальних результатів і нові теоретичні передбачення

Перейдемо до аналізу запропонованої ефективної теорії, яка мала б добре працювати при низьких температурах поблизу поля насичення [див. (3.3) і розділи 3.2 і 3.3]. Перш за все перевіримо точність розробленого ефективного опису. Для цього виконаємо точну діагоналізацію [87] для початкової та ефективної моделей на скінченних ґратках із накладеними періодичними граничними умовами. А саме, розглянемо початкову (квантову) модель (3.1), яка є $N = 16 = 2 \times 8$ квадратною двошаровою ґраткою і ефективну (класичну) модель (3.8) чи (3.20), яка є $\mathcal{N} = 8$ квадратною ґраткою. На рис. 3.3 порівнюються криві намагніченості в основному стані з такими параметрами: $J_2 = 5$, $J_1 = 1$, $\Delta_2 = \Delta_1 = \Delta$ з $\Delta = 0.5, 0.1, 0$ і магнітним полем, прикладеним вздовж осі z (суцільні лінії), та магнітним полем, прикладеним вздовж осі x (штрихові лінії). Для поля вздовж осі z криві для обох моделей практично збігаються, в той час як для поля вздовж

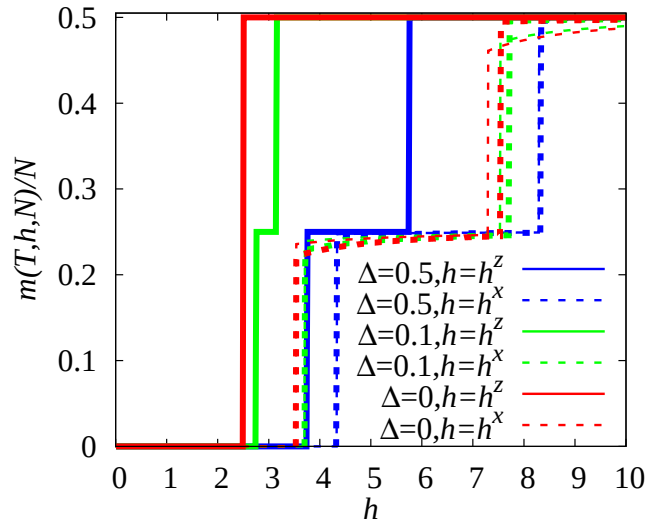


Рис. 3.3. Криві намагніченості при $T = 0$ для $J_2 = 5$, $J_1 = 1$ і декількох параметрів анізотропії $\Delta_1 = \Delta_2 = \Delta$: дані точної діагоналізації для початкової моделі ($N = 16$; тонкі) порівнюються з даними для ефективної моделі ($\mathcal{N} = 8$, товсті). Сині лінії: $\Delta = 0.5$, зелені лінії: $\Delta = 0.1$, червоні лінії: $\Delta = 0$. Суцільні лінії відповідають випадку $\mathbf{h} = (0, 0, h)$, а штрихові лінії — випадку $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$.

осі x узгодженість залишається дуже доброю, зокрема, на плато "половина від намагніченості насичення", де стан "кристал локалізованих магнонів" є точним власним станом гамільтоніана (3.1).

Тепер перейдемо до конкретного випадку сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Сильний внутрішньодимерний параметр обмінної взаємодії, оцінений у [19] як $J_2 = 110$ К, а параметр анізотропії внутрішньодимерної взаємодії — $\Delta_2 = 0.149$. Великі внутрішньодимерні взаємодії і визначають низькотемпературний процес намагнічування сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Як згадувалося вище, всі міждимерні зв'язки експериментально не можна розрізнити, тому природно вважати їх однаковими, коли виконуватиметься умова ідеально плоскої зони. Числові значення для міждимерних взаємодій знайдені в [19]: $4J_1 = 23.7$ К і $\Delta_1 = 0.56$. Пригадаймо також значення для g -факторів: $g^z = 2.0$ і $g^x = 3.86$ [19]. Збираючи все це разом і вимірюючи прикладене магнітне поле $\mathbf{H}$ у теслах, приходимо до таких формул для параметрів H_{eff} у (3.3): для поля $\mathbf{H}$, прикладеного вздовж осі z , отримуємо $C \approx (-0.67H - 25.84)\mathcal{N}$ К, $h \approx -(1.34H - 69.85)$ К, $J \approx 3.33$ К. У випадку поля $\mathbf{H}$, прикладеного вздовж

осі x , ефективні параметри задаються більш складними формулами, див. підрозділ 3.3. Проте в діапазоні полів від 30 Т до 45 Т, що якраз стосується сценарію з локалізованими магнонами, ці параметри змінюються майже лінійно з полем $\mathbf{H}$ таким чином: $C \approx -53.70 \dots -72.45$ К, $h \approx -16.24 \dots 21.01$ К і $J \approx 5.43 \dots 5.70$ К. Зазначимо, що для результатів, які обговорюються нижче, ми використовували повні формули для ефективних параметрів, приведені в підрозділі 3.3.

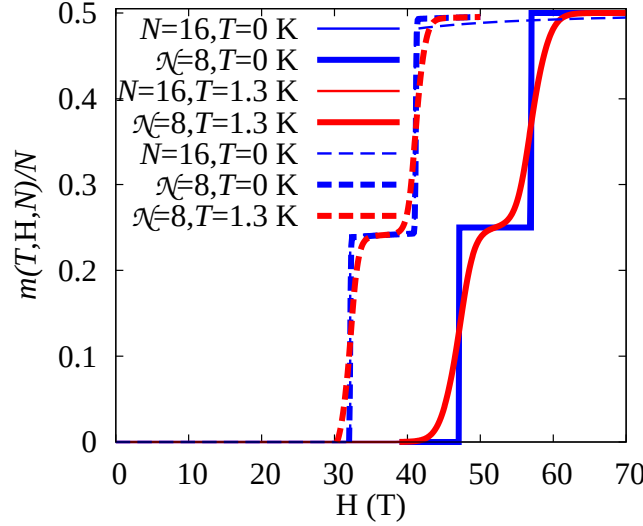


Рис. 3.4. Криві намагніченості для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ ($J_2 = 110$ К, $\Delta_2 = 0.149$, $4J_1 = 23.7$ К, $\Delta_1 = 0.56$) [19] при $T = 0$ К (сині) і $T = 1.3$ К (червоні). Дані точної діагоналізації для початкової моделі ($N = 16$, тонкі лінії) порівняні з відповідними даними для ефективної моделі ($\mathcal{N} = 8$, товсті лінії). Зауважимо, що відповідні тонкі та товсті лінії збігаються в широкому діапазоні. Суцільні лінії представляють дані для $\mathbf{h} = (0, 0, h^z)$, $g^z = 2.0$, а штрихові лінії для $\mathbf{h} = (h^x, 0, 0)$, $g^x = 3.86$, де $\mathbf{H} = h^\alpha / (g^\alpha \mu_B)$, $\alpha = z, x$.

На рисунку 3.4 представлені результати точної діагоналізації для кривих намагніченості для сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ для обох напрямків магнітного поля. Ці криві добре збігаються з експериментальними кривими (див. рис. 3 у [19]; тут треба зауважити, що експериментальні дані інакше нормовані). Зауважимо також, що $T = 1.3$ К, використана для ізотермічної намагніченості $m(\mathbf{H})$ на рисунку 3.4, не може бути ідентифікована як температура $T = 1.3$ К, зазначена на рисунку 3 у [19], тому що в [19] для вимірювання $m(\mathbf{H})$ використовувалося імпульсне магнітне поле, тобто, вимірювальний процес скоріше адіабатичний, ніж ізотермічний.

Стрибки намагніченості на рисунку 3.4 відбуваються при критичних значеннях полів $H_c \approx 47.04$ Т і $H_{\text{sat}} \approx 56.94$ Т, якщо поле прикладено вздовж осі z , та при $H_c \approx 32.16$ Т і $H_{\text{sat}} \approx 41.14$ Т, якщо поле прикладено вздовж осі x . Ці значення добре збігаються з відповідними експериментальними даними [19]: $H_c = 46.8$ Т, $H_{\text{sat}} = 56.7$ Т і $H_c = 32.0$ Т, $H_{\text{sat}} = 41.0$ Т. Таким чином, можна зробити висновок, що розроблений теоретичний підхід забезпечує добрий опис виміряних даних для процесу намагнічування сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ не тільки у сильних магнітних полях, а у всьому інтервалі полів.

Проаналізуємо далі теплоємність c в області плато $H_c < H < H_{\text{sat}}$. Тут є передбачення теорії, але поки що немає результатів вимірювання. У статті [19] приведено теплоємність лише в нульовому полі. У нульовому полі передбачається лише один пік у залежності $c(T)$ при $T \approx 25$ К (дані точної діагоналізації для $N = 16$, див. рис. 3.5). Але у сильних магнітних полях у системі виникає новий масштаб енергій, пов'язаний із появою локалізованих багатоманонних станів, що приводить до появи нової низькотемпературної поведінки теплоємності. Для поля $H \approx 51.99$ Т, прикладеного вздовж осі z , і для поля $H \approx 36.61$ Т, прикладеного вздовж осі x , ефективне поле h у (3.3) зникає, і відповідні ефективні константи зв'язку J дають температури переходу Ізинга-Онзагера: $T_c \approx 1.89$ К (у полі вздовж осі z) і $T_c \approx 3.17$ К (у полі вздовж осі x).

На лівій панелі рисунка 3.5 показано дані точної діагоналізації для теплоємності $c(T)$ при $H = 47.5$ Т вздовж осі z для ефективної моделі з ($\mathcal{N} = 8$ і 16) та для початкової моделі з ($N = 16$), так само як і дані обчислень методом класичного Монте Карло для ефективної моделі з $\mathcal{N} = \mathcal{L}^2$ вузлів із $\mathcal{L}$ аж до 256. Логарифмічна сингулярність при $T_c \approx 0.46$ К (для $H = 47.5$ Т) з'являється для достатньо великих розмірів системи. При $H = 0$ для $c(T)$ немає жодної сингулярності. Цей рисунок також підтверджує, що скінченнорозмірні дані для ефективної та повної початкової моделей збігаються аж до $T \approx 10$ К [зелені ($\mathcal{N} = 8$) і пурпурні ($N = 16$) лінії на лівій панелі рисунка 3.5], тобто, далеко за межами $T_c \approx 0.46$ К. Це свідчить про надійність зробленого передбачення про фазовий перехід при $T \approx 0.46$ К. Окрім сингулярності при T_c можна побачити явні ознаки розділення

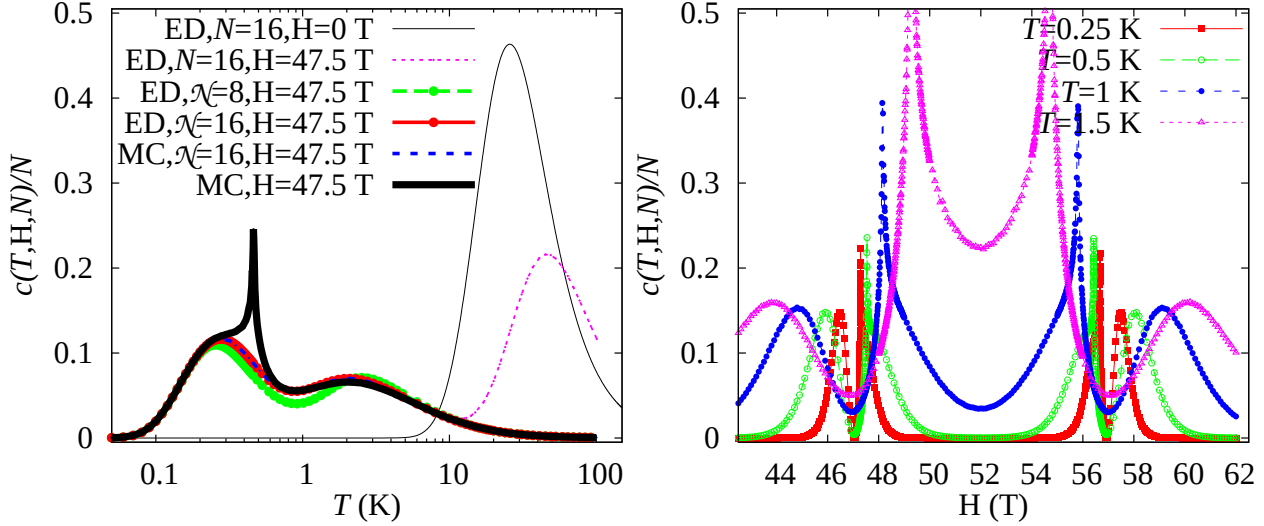


Рис. 3.5. Ліва панель: дані точної діагоналізації (початкова та ефективна моделі з $N = 16$ і $\mathcal{N} = 8$) та класичного Монте Карло (ефективна модель із $\mathcal{N}$ аж до 256×256) для температурної залежності теплоємності для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ (див. текст дисертації) при $H = 47.5$ Т вздовж осі z ($T_c \approx 0.46$ К). Права панель: дані класичного Монте Карло (ефективна модель із $\mathcal{N}$ аж до 256×256) для теплоємності для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ (див. текст дисертації) при $T = 0.25, 0.5, 1, 1.5$ К для поля, прикладеного вздовж осі z .

енергетичних масштабів, на що вказують два максимуми в ефективній моделі, й навіть три максимуми в повній початковій моделі, де високотемпературний максимум є пов'язаний із обмінною взаємодією J_2 . Цей масштаб не є представлений у ефективній моделі, де взаємодія $J \propto J_1$. Максимум при помірних температурах є пов'язаний із J , а низькотемпературний максимум відповідає масштабу енергії, встановленому виродженою множиною станів, які є основними станами при H_{sat} і H_c . Положення низькотемпературного максимуму залежить від значення H , яке є у межах $H_c < H < H_{\text{sat}}$, і низькотемпературний максимум зміщується до $T = 0$, коли $H \rightarrow H_{\text{sat}}$ і коли $H \rightarrow H_c$. Іншим способом, за допомогою якого можна виявити фазовий перехід, є фіксування температури T і використання поля H як керуючого параметра. Відповідна залежність $C(H)$ при фіксованій T показана на правій панелі рисунка 3.5, де представлені дані Монте Карло для $c(H)$, коли поле прикладене вздовж осі z при фіксованих температурах $T = 0.25, 0.5, 1, 1.5$ К.

Варто зауважити, що дуже подібна поведінка $c(T)$ і $c(H)$ виявлена для поля, при-

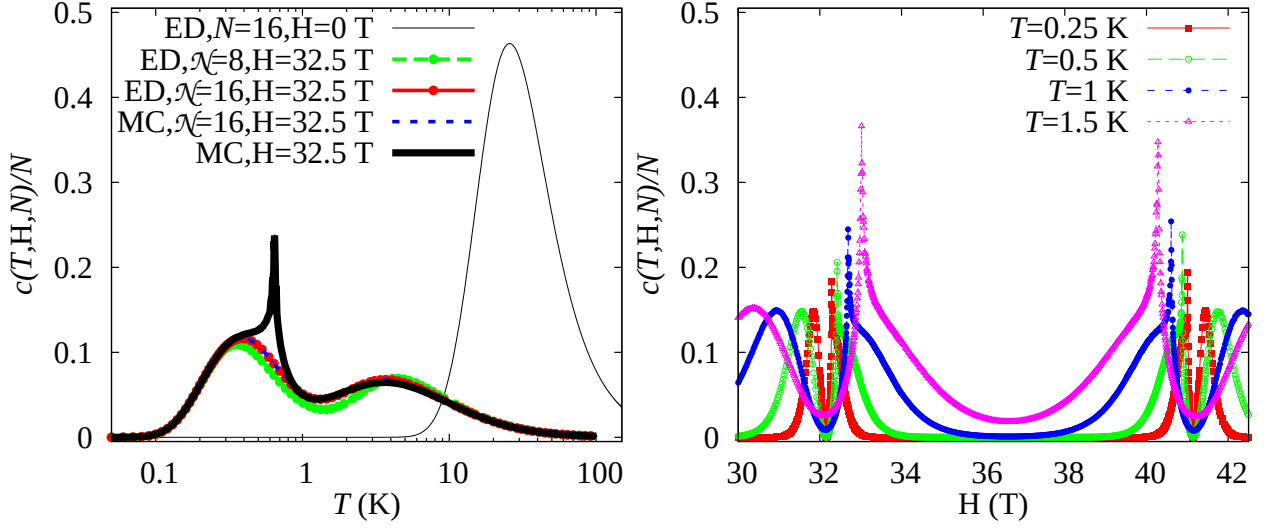


Рис. 3.6. Ліва панель: дані точної діагоналізації (початкова та ефективна моделі з $N = 16$ і $\mathcal{N} = 8$) та класичного Монте Карло (ефективна модель із $\mathcal{N}$ аж до 256×256) для температурної залежності теплоємності для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ (див. текст дисертації) при $H = 32.5$ Т вздовж осі x ($T_c \approx 0.64$ К). Права панель: дані класичного Монте Карло (ефективна модель із $\mathcal{N}$ аж до 256×256) для теплоємності для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ (див. текст дисертації) при $T = 0.25, 0.5, 1, 1.5$ К для поля, прикладеного вздовж осі x .

кладеного вздовж осі x (див. рис. 3.6). Таким чином відповідні вимірювання для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ є надзвичайно бажаними для підтвердження цих передбачень.

Основним результатом, що підсумовує всі наведені вище висновки, є фазова діаграма для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у площині "магнітне поле – температура" (див. рис. 3.7). Криві, представлені на рисунку, були отримані з результатів статей [88, 89]. Із цієї фазової діаграми можна зробити висновок, що, прикладаючи поле $H > 32.16$ Т ($H > 47.04$ Т) вздовж осі x (вздовж осі z) до сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$, будемо спостерігати впорядкування локалізованих магنونів (кристал Вігнера з локалізованих магنونів), а відповідний фазовий перехід належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. Цей фазовий перехід можна виявити за допомогою вимірювання теплоємності c , яка має виявляти логарифмічну сингулярність у своїй температурній залежності при $T_{\text{trans}}(H)$ чи у своїй

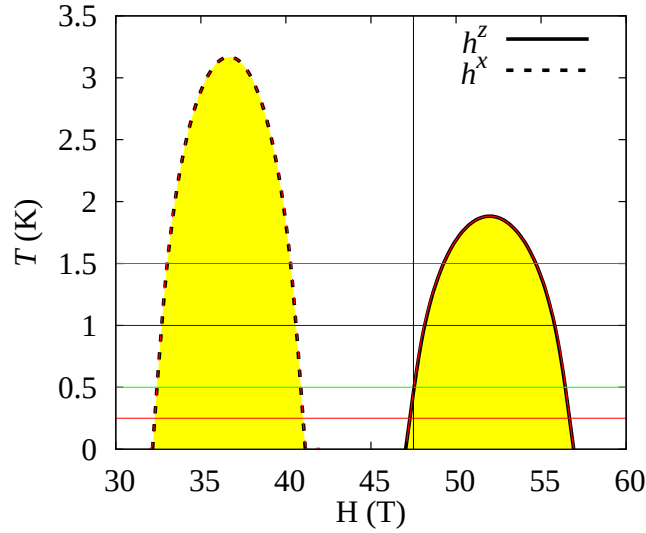


Рис. 3.7. Теоретично передбачена фазова діаграма для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у площині "магнітне поле – температура" для $\mathbf{h} = (0, 0, h^z)$ (суцільні) і $\mathbf{h} = (h^x, 0, 0)$ (штрихові). Горизонтальні (вертикальна) лінії відповідають лініям такого ж кольору на рисунках 3.5, 3.6, праві панелі (рис. 3.5, ліва панель).

залежності від магнітного поля при $H_{\text{trans}}(T)$. Залежності $T_{\text{trans}}(H)$ і $H_{\text{trans}}(T)$ задані на рисунку 3.7.

3.5. Висновки

У цьому розділі представлено результати дослідження низькотемпературних властивостей спин-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на фрустрованій квадратній двошаровій ґратці в магнітному полі в контексті експериментів з $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Модель вивчено в полях двох різних напрямків: $\mathbf{h} = (h^x, 0, 0)$ і $\mathbf{h} = (0, 0, h^z)$. Для кожного напрямку поля, за допомогою операторної теорії збурень, отримано ефективний гамільтоніан. Ефективні моделі є простішими для вивчення й дозволяють дослідити властивості вихідної фрустрованої квантової спінової моделі.

Показано, що сполука $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ є багатообіцяючим кандидатом на реалізацію плоскостонної фізики в сильно фрустрованому квантовому магнетикі. На основі концепції локалізованих магнонів розроблено теорію для опису експериментальних даних у сильних магнітних полях [19]. Найважливішим результатом

теорії є передбачення фазового переходу, пов'язаного з впорядкуванням локалізованих магнонів. Цей фазовий перехід відбувається в сильних магнітних полях $H > 32.16$ Т і при низьких температурах $T < 3.17$ К і ним можна керувати як за допомогою температури, так і за допомогою магнітного поля. Щоб виявити цей перехід на експерименті, запропоновано провести низькотемпературні вимірювання теплоємності c при $H > 32.16$ Т для знаходження характерної логарифмічної сингулярності в температурному профілі теплоємності $c(T)$. Результати цього розділу опубліковано в статті [23].

РОЗДІЛ 4

НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНІ ВЛАСТИВОСТІ КВАНТОВОЇ СПІНОВОЇ ШЕСТИКУТНОЇ ДВОШАРОВОЇ ҐРАТКИ У МАГНІТНОМУ ПОЛІ

Розгляньмо антиферромагнітну спінову модель Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці (див. рис. 4.1). Ця модель є цікавою як і з експериментальної точки зору, так і з теоретичної. З одного боку, модель виникає з експериментів над сполукою $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$, в якій іони Mn^{4+} утворюють фрустрований спін-3/2 двошар із шестикутних ґраток [47–50, 63]. З іншого боку, є теоретичні дослідження, в яких розглядаються властивості основного стану та низькотемпературні властивості антиферромагнетика Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці [61, 62], в яких, із використанням різноманітних аналітичних і числових методів, обговорюються випадки як із класичним спіном [61], так із квантовим спіном $s = 1/2$ [62] у ненульовому магнітному полі [61] та в нульовому магнітному полі [62] (див. також розділ 2). Випадок спіну $s = 1/2$ за наявності магнітного поля, однак, досі не вивчено. У цьому випадку можливо застосувати цілком інший підхід, який ґрунтується на теорії локалізованих магнонів [5, 80, 82, 83, 90, 91]. Цей підхід дозволяє отримати низькотемпературні термодинамічні характеристики системи. Матеріал цього розділу опубліковано в статтях [21, 22].

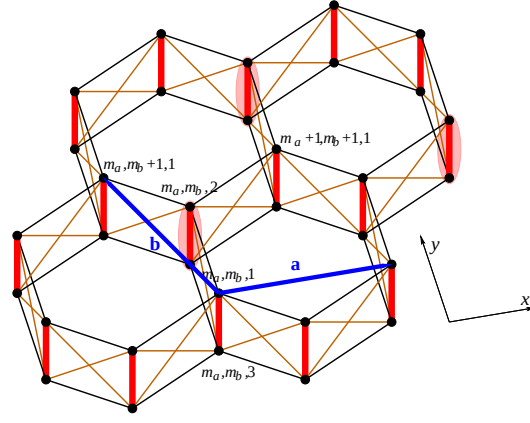


Рис. 4.1. Фрустрований шестикутний двошар. Його можна розглядати як трикутну ґратку з чотирма вузлами в елементарній комірці. $\mathbf{a}$ і $\mathbf{b}$ — базисні вектори трикутної ґратки, а цілі числа m_a і m_b визначають розташування елементарної комірки. Вертикальні (червоні) зв'язки мають константу взаємодії J_2 . Зв'язки найближчих сусідів у окремому шарі (чорні) мають константу взаємодії J_1 . Фрустровані зв'язки між шарами (коричневі) мають константу взаємодії J_X .

4.1. Незалежні і взаємодіючі локалізовані магнони

У цьому розділі розглядається спін-1/2 антиферромагнітна модель Гайзенберга з гамільтоніаном

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \quad J_{ij} > 0, \quad S^z = \sum_i s_i^z \quad (4.1)$$

на шестикутній двошаровій ґратці, яка складається з $N = 2\mathcal{N}$ вузлів (див. рис. 4.1). Перша сума в рівнянні (4.1) пробігає всі зв'язки ґратки, а сума за i ведеться за всіма вузлами ґратки. Далі, J_{ij} набуває трьох різних значень: J_2 (димерні зв'язки), J_1 (зв'язки найближчих сусідів у окремому шарі) і J_X (фрустровані зв'язки між шарами) (див. рис. 4.1).

Важливо відзначити, що z компонента повного спіну S^z комутує з гамільтоніаном системи H (4.1), тобто $[S^z, H] = 0$. Це дає змогу розглядати підпростори з різними значеннями S^z окремо.

У режимі сильних магнітних полів низькотемпературна поведінка системи вимагає розгляду лише підпросторів з великими S^z . Розгляньмо випадок $J_X = J_1$, який називатимемо "випадком ідеальної фрустрації" (чи "ідеальним плоскостон-

ним випадком"). Єдиний стан із $S^z = N/2$ є повністю поляризованим станом $|\dots \uparrow \dots\rangle$ з енергією $E_{\text{FM}} = N(J_2/8 + 3J_1/4)$.

Розрахуємо енергетичний спектр системи в підпросторі з $S^z = N/2 - 1$ (одномагнонний підпростір). Для знаходження енергії магнона виберемо систему координат як на рисунку 4.1 і введемо вектори **a** та **b**. Шестикутний двошар можна розглядати як трикутну ґратку з чотирма вузлами в елементарній комірці. Введемо $\mathcal{N} = N/2$ — число вертикальних зв'язків у двошарі, тоді $\mathcal{N}/2 = \mathcal{L}^2$ визначатиме число вузлів у трикутній ґратці. Для розрахунку спектру одномагнонних збуджень можна скористатися перетворенням Гольштайна-Примакова [92]:

$$s_i^+ = \sqrt{2s} \sqrt{1 - \frac{1}{2s} b_i^\dagger b_i b_i}, \quad s_i^- = \sqrt{2s} b_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{1}{2s} b_i^\dagger b_i}, \quad s_i^z = s - b_i^\dagger b_i. \quad (4.2)$$

Оскільки нас цікавить тільки одномагнонний випадок, то взятий у (4.2) лише перший доданок ряду для квадратного кореня даватиме точний результат.

Позначимо через $A_{m_a, m_b}^\alpha (A_{m_a, m_b}^{\alpha\dagger})$ і $B_{m_a, m_b}^\alpha (B_{m_a, m_b}^{\alpha\dagger})$ Бозе-оператори в елементарній комірці на вузлах першого та другого димерів відповідно, де $\alpha = 1, 2$ нумерує вузли на димері. Після виконання очевидних перетворень та з використанням (4.2) гамільтоніан (4.1) набуде вигляду:

$$\begin{aligned} H = \sum_{m_a=1}^{\mathcal{L}} \sum_{m_b=1}^{\mathcal{L}} & \left[\frac{J_2}{2} (A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^2 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^1) \right. \\ & - \frac{J_2}{2} (A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) \\ & + \frac{J_2}{2} (B_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^2 + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^1) \\ & - \frac{J_2}{2} (B_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2) \\ & + \frac{J_1}{2} (B_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 \\ & \quad + B_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^2 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^1) \\ & + \frac{J_1}{2} (B_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^2 \\ & \quad + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2) \\ & \left. - J_1 (A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) \right] \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + B_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2) \\
& + \frac{J_1}{2} (B_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 + A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 \\
& \quad + B_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2 + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^1) \\
& + \frac{J_1}{2} (B_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 + A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^2 \\
& \quad + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2 + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2) \\
& - J_1 (A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2 \\
& \quad + B_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2) \\
& + \frac{J_1}{2} (B_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b+1}^1 + A_{m_a+1, m_b+1}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 \\
& \quad + B_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b+1}^2 + A_{m_a+1, m_b+1}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^1) \\
& + \frac{J_1}{2} (B_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b+1}^1 + A_{m_a+1, m_b+1}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^2 \\
& \quad + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b+1}^2 + A_{m_a+1, m_b+1}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2) \\
& - J_1 (A_{m_a+1, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b+1}^1 + A_{m_a+1, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b+1}^2 \\
& \quad + B_{m_a, m_b}^{1\dagger} B_{m_a, m_b}^1 + B_{m_a, m_b}^{2\dagger} B_{m_a, m_b}^2)] . \tag{4.3}
\end{aligned}$$

Далі, введемо перетворення Фур'є:

$$\begin{aligned}
A_{m_a, m_b}^{\alpha\dagger} &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp [i (k_a m_a + k_b m_b)] A_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger}, \\
A_{m_a, m_b}^{\alpha} &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp [-i (k_a m_a + k_b m_b)] A_{\mathbf{k}}^{\alpha}, \\
B_{m_a, m_b}^{\alpha\dagger} &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp [i (k_a m_a + k_b m_b)] B_{\mathbf{k}}^{\alpha\dagger}, \\
B_{m_a, m_b}^{\alpha} &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp [-i (k_a m_a + k_b m_b)] B_{\mathbf{k}}^{\alpha}. \tag{4.4}
\end{aligned}$$

Тут $\mathbf{k} = k_a \frac{2}{3a_0} \left(\frac{\sqrt{3}}{2} \mathbf{i} + \frac{1}{2} \mathbf{j} \right) + k_b \frac{2}{3a_0} \mathbf{j}$, $k_a = \frac{2\pi}{\mathcal{L}} p$, $k_b = \frac{2\pi}{\mathcal{L}} p$, $p = 1, 2, \dots, \mathcal{L}$. Застосувавши перетворення (4.4) до рівняння (4.3), можна записати гамільтоніан у матричній формі:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} & A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} & B_{\mathbf{k}}^{1\dagger} & B_{\mathbf{k}}^{2\dagger} \end{pmatrix} \mathbf{H} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}}^1 \\ A_{\mathbf{k}}^2 \\ B_{\mathbf{k}}^1 \\ B_{\mathbf{k}}^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} -\frac{J_2}{2} - 3J_1 & \frac{J_2}{2} & \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}} & \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}} \\ \frac{J_2}{2} & -\frac{J_2}{2} - 3J_1 & \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}} & \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}} \\ \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}}^* & \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}}^* & -\frac{J_2}{2} - 3J_1 & \frac{J_2}{2} \\ \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}}^* & \frac{J_1}{2}\gamma_{\mathbf{k}}^* & \frac{J_2}{2} & -\frac{J_2}{2} - 3J_1 \end{pmatrix}, \quad (4.5)$$

де $\gamma_{\mathbf{k}} = 1 + \exp(ik_b) + \exp[i(k_a + k_b)]$.

Матриця $\mathbf{H}$ у (4.5) має такі власні значення:

$$\Lambda_{\mathbf{k}}^{(1)} = \Lambda_{\mathbf{k}}^{(2)} = -J_2 - 3J_1, \quad \Lambda_{\mathbf{k}}^{(3,4)} = -3J_1 \mp J_1|\gamma_{\mathbf{k}}|, \\ |\gamma(\mathbf{k})| = \sqrt{3 + 2[\cos k_a + \cos k_b + \cos(k_a + k_b)]}. \quad (4.6)$$

Ці значення енергії утворюють чотири одномагнетонні зони (див. рис. 4.2), дві

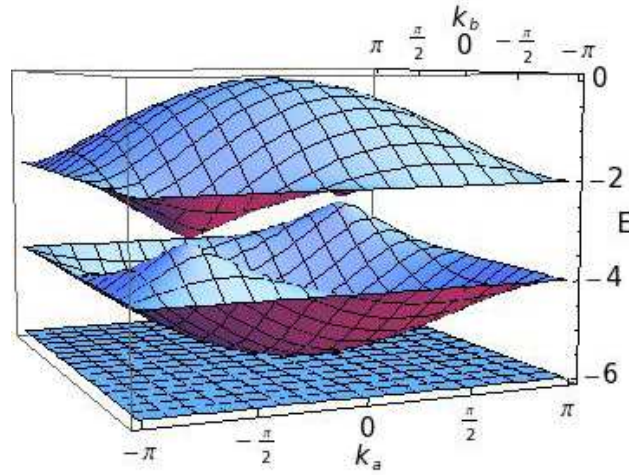


Рис. 4.2. Енергетичний одномагнетонний спектр шестикутної двохарової ґратки (4.6). Тут $J_2 = 3J_1$, $J_1 = J_X = 1$.

з яких є бездисперсійні (плоскі) з однаковою енергією. У виразах для енергій $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$, $k_a = \sqrt{3}a_0k_x$, $k_b = 3a_0k_y/2 - \sqrt{3}a_0k_x/2$, де a_0 — довжина сторони шестикутника; $\mathbf{k}$ набуває $\mathcal{N}/2$ значень із першої зони Брилюена.

$\mathcal{N}$ станів із двох плоских зон можуть бути вибрані як набір локалізованих станів, в яких перевернутий спин знаходиться на одному з $\mathcal{N}$ вертикальних димерів (див. рис. 4.1). Решта $\mathcal{N}$ станів (із двох дисперсійних зон) не є локалізованими,

а розсосереджені на всій ґратці. Як можна побачити з рівняння (4.6), двічі вироджена плоска одномагنونна зона стає найнижчою енергетичною зоною, коли

$$J_2 > J_2^c = 3J_1, \quad (4.7)$$

тобто, якщо константа взаємодії на вертикальному зв'язку J_2 є достатньо великою. В подальшому вважатимемо, що ця нерівність виконується. З одномагنونного спектру (4.6) також можна одержати значення поля насичення, адже $-J_2 - 3J_1 + h_{\text{sat}} = 0$:

$$h_{\text{sat}} = J_2 + 3J_1. \quad (4.8)$$

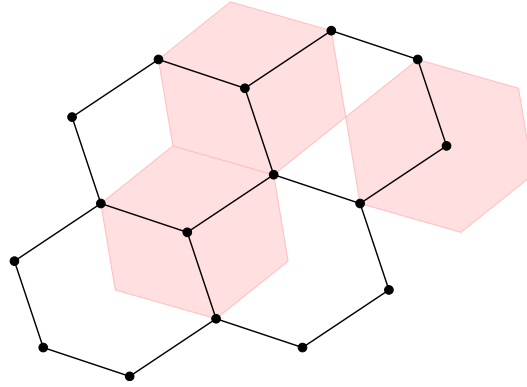


Рис. 4.3. Незалежні стани локалізованих магنونів (відповідно до затінених вертикальних магنونів [див. рис. 4.1]) і конфігурації жорстких шестикутників на допоміжній шестикутній ґратці.

Важливо, через локалізований характер найнижчих одномагنونних станів можна збудувати багатемагنونні основні стани у просторах з $S^z < N/2 - 1$. Оскільки одномагنونні локалізовані стани мають найнижчу енергію в одномагنونному підпросторі, то основні стани в підпросторах із $S^z = N/2 - n$, $n = 2, \dots, n_{\text{max}}$, де $n_{\text{max}} = \mathcal{N}/2 = N/4$, можуть бути отримані "заселенням" димерів локалізованими магнонами. Проте, щоб залишатися в множині основних станів, потрібно дотримуватися обмеження, яке накладає правило жорстких об'єктів. Тобто, сусідні вертикальні димери не можуть бути заселеними одночасно, так як це призведе до зростання енергії. Таким чином, приходимо до відображення

основних станів вихідної фрустрованої квантової спінової системи на простір конфігурацій моделі класичного ґраткового газу жорстких шестикутників на допоміжній шестикутній ґратці. Кожний основний стан квантової спінової моделі можна розглядати як просторову конфігурацію жорстких шестикутників на шестикутній ґратці, виключаючи заселення сусідніх вузлів (правило жорстких об'єктів) (див. рис. 4.3).

Заселення сусідніх вузлів (воно виключене для множини основних станів) при $S^z = N/2 - 2, \dots, N/4$ приводить до іншого класу локалізованих власних станів H , які можна візуалізувати як перекривання шестикутників на шестикутній ґратці. Ці стани були повністю описані у [17, 18, 93] на прикладі одновимірної двоногої драбинки й фрустрованої квадратної двошарової ґратки. Кожна пара шестикутників, що перекриваються (тобто, заселені сусідні димери локалізованими магнонами), збільшує енергію системи на J_1 . Якщо J_2/J_1 є достатньо великим, то стани, утворені перекриванням шестикутників, будуть найнижчими збудженими станами в підпросторах із $S^z = N/2 - 2, \dots, N/4$. Крім того, вони будуть основними станами в підпросторах із меншими значеннями S^z . Із даних точної діагоналізації для $N = 24, 32, 36, 48$ можна визначити достатньо великі значення J_2/J_1 як 3.687, 3.781, 3.813, 3.874, відповідно. Для цих значень J_2/J_1 перші збуджені стани в підпросторі з $S^z = N/2 - 2$ є стани, утворені перекриванням шестикутників. Зауважимо, що нерівність $J_2/J_1 > 3$ дещо посилюється, якщо ми включаємо в опис крім незалежних локалізованих магنونів і взаємодіючі локалізовані магнони.

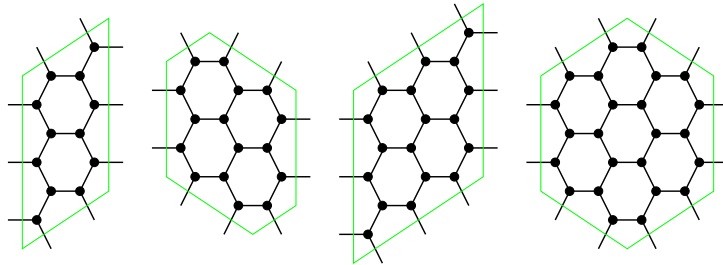


Рис. 4.4. Скінченні ґратки, що використовуються для обчислень методом точної діагоналізації з $\mathcal{N} = 12, 16, 18, 24$, тобто $N = 24, 32, 36, 48$ (зліва направо). На ґратки накладені періодичні граничні умови.

Ці зроблені твердження про характер основних і збуджених станів квантової спінової шестикутної двошарової ґратки перевіряються за допомогою аналізу даних точної діагоналізації. Зрозуміло, що точна діагоналізація є обмежена скінченими ґратками (див. рис. 4.4). Кратність виродження основних станів збігається з числом просторових конфігурацій жорстких шестикутників на шестикутній ґратці для всіх випадків, що розглядаються (див. табл. 4.1). У табл. 4.1 також представлено енергію щілини Δ між першим основним станом і збудженим станом та кратність виродження першого збудженого стану. В одномагнетонному підпросторі (4.6) $\Delta = J_2 - 3J_1$. Енергетична щілина в підпросторах із $S^z = N/2 - n$, $n = 2, \dots, N/2 - 1$ узгоджується з припущенням, що для достатньо великого $J_2/J_1 \gtrsim 4$ перші збуджені стани є іншими локалізованими магнонами, для яких два локалізовані магнони є сусідами (два жорсткі шестикутники перекриваються). Подальше підтвердження цієї картини дається значенням $\Delta = 2J_1$ для $S^z = N/4$. Перший збуджений стан, по відношенню до стану "кристал локалізованих магнонів", відповідає перекриттю трьох жорстких шестикутників, яке підвищує енергію системи на $2J_1$.

Перейдемо до аналізу спостережуваних величин. На рисунку 4.5 суцільною товстою червоною кривою представлено намагніченість квантової спінової шестикутної двошарової ґратки при нульовій температурі для $J_2 = 5$ і $J_1 = 1$. Крива намагніченості зондує множину основних станів і є в чудовій згоді з вищеописаною картиною. Є два характеристичні поля: $h_2 = J_2$ і $h_{\text{sat}} = J_2 + 3J_1$, при яких крива намагніченості в основному стані має стрибок. Щоб продемонструвати стійкість цих особливостей кривої намагнічення щодо відхилень від випадку ідеальної фрустрації, на рисунку 4.5 також показана крива, коли J_X трохи відрізняється від J_1 . Бачимо, що плато намагніченості зберігаються навіть при незначних відхиленнях від умови ідеальної фрустрації $J_X = J_1$.

Табл. 4.1. $\mathcal{N} = 12, 16, 18, 24$: точна діагоналізація [$J_1 = 1$, $J_2 = 5$ (для $\mathcal{N} = 12, 24$) і $J_2 = 10$ (для $\mathcal{N} = 16, 18$)] у порівнянні з підрахунком числа конфігурацій жорстких шестикутників. DGS — виродження основного стану, Δ — енергетична щілина, D1ES — виродження першого збудженого стану, # HHS — число конфігурацій жорстких шестикутників.

N	S^z	DGS	Δ	D1ES	# HHS
24	11	12	2	1	12
	10	48	1	18	48
	9	76	1	108	76
	8	45	1	168	45
	7	12	1	48	12
	6	2	2	42	2
	5	12	1	48	—
32	15	16	7	1	16
	14	96	1	24	96
	13	272	1	240	272
	12	376	1	816	376
	11	240	1	1104	240
	10	—	1	—	72
	9	—	1	—	16
	8	—	2	—	2
36	17	18	7	1	18
	16	126	1	27	126
	15	438	1	324	438
	14	801	1	1404	801
	13	—	1	—	756
	12	—	1	—	348
	11	—	1	—	90
	10	—	1	—	18
	9	—	2	—	2
48	23	24	2	1	24
	22	240	1	36	240
	21	1304	1	648	1304
	20	—	—	—	4212
	19	—	—	—	8328
	18	—	—	—	10036
	17	—	—	—	7176
	16	—	—	—	2964
	15	—	—	—	752
	14	—	—	—	156
	13	—	—	—	24
	12	—	—	—	2

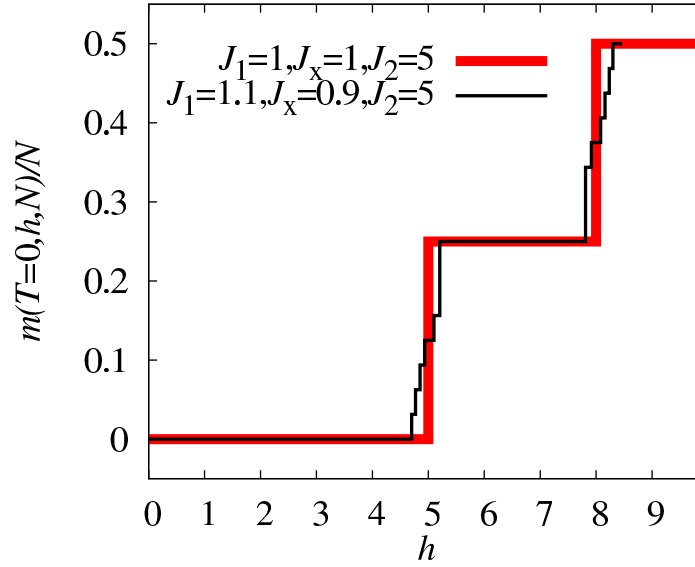


Рис. 4.5. Результати точної діагоналізації для кривої намагніченості при нульовій температурі для спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга, заданого на шестикутній двошаровій ґратці. Суцільною товстою червоною лінією представлено випадок ідеальної фрустрації при $J_1 = 1$, $J_2 = 5$. Хоча дані відповідають ґратці з $N = 32$ вузлами, ефекти скінченності N відсутні. Крива намагніченості має два стрибки: при $h = h_2 = J_2 = 5$ і $h = h_{\text{sat}} = J_2 + 3J_1 = 8$. Суцільна тонка чорна лінія представляє криву намагніченості при нульовій температурі, коли $J_1 = 1.1$, $J_x = 0.9$, $J_2 = 5$ для $N = 32$, тобто для невеликого відхилення від випадку ідеальної фрустрації.

4.2. Жорсткі шестикутники на шестикутній ґратці

У сильних магнітних полях найнижчі власні стани в підпросторах із великими S^z стають основними станами. Енергія цих найнижчих станів у підпросторах із $S^z = N/2 - n$, де $n = 0, 1, \dots, n_{\text{max}}$, $n_{\text{max}} = N/4$ за наявності магнітного поля h має такі значення:

$$E_n^{\text{lm}}(h) = E_{\text{FM}} - h \frac{N}{2} - (\epsilon_1 - h) n, \quad \epsilon_1 = J_2 + 3J_1 = -\Lambda_{\mathbf{k}}^{(1)} = -\Lambda_{\mathbf{k}}^{(2)}. \quad (4.9)$$

При полі насичення, тобто, коли $h = h_{\text{sat}} = \epsilon_1$, всі ці енергії стають незалежними від n і $E_n^{\text{lm}}(h_{\text{sat}}) = E_{\text{FM}} - \epsilon_1 N/2$. Тому система має велику кратність виродження основних станів $\mathcal{W}$ при h_{sat} : $\mathcal{W} = \sum_{n=0}^{N/2} g_{\mathcal{N}}(n)$. Це число $\mathcal{W}$ росте експоненційно з розміром системи N [7, 94]: $g_{\mathcal{N}}(n) \approx \exp(0.218N)$, про що йтиметься нижче. Тут $g_{\mathcal{N}}(n)$ позначає кратність виродження основного стану для $2\mathcal{N}$ -вузлового фру-

строваного шестикутного двошару в підпросторі з $S^z = N/2 - n$. Вклад станів незалежних локалізованих магنونів у статистичну суму задається такою формулою (див. [7, 90, 95]):

$$Z_{\text{lm}}(T, h, N) = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}} g_{\mathcal{N}}(n) \exp \left[-\frac{E_n^{\text{lm}}(h)}{T} \right]. \quad (4.10)$$

Тут $g_{\mathcal{N}}(n) = Z_{\text{hc}}(n, \mathcal{N})$ — це канонічна статистична сума n жорстких шестикутників на $\mathcal{N}$ -вузловій шестикутній ґратці. Тому співвідношення (4.10) може бути переписане як

$$Z_{\text{lm}}(T, h, N) = \exp \left(-\frac{E_{\text{FM}} - h \frac{N}{2}}{T} \right) \Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}),$$

$$\Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) = \sum_{n=0}^{\frac{N}{2}} Z_{\text{hc}}(n, \mathcal{N}) \exp \left(\frac{\mu n}{T} \right), \quad \mu = \epsilon_1 - h. \quad (4.11)$$

Тут Ξ_{hc} — велика канонічна статистична сума жорстких шестикутників на $\mathcal{N}$ -вузловій шестикутній ґратці з хімічним потенціалом μ . На основі (4.11) одержуємо співвідношення:

$$\frac{F_{\text{lm}}(T, h, N)}{N} = \frac{E_{\text{FM}}}{N} - \frac{h}{2} + \frac{1}{2} \frac{\Omega_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})}{\mathcal{N}},$$

$$\Omega_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) = -T \ln \Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) \quad (4.12)$$

для вільної енергії на один вузол $f(T, h)$,

$$\frac{M_{\text{lm}}(T, h, N)}{N} = \frac{1}{2} + \frac{1}{2} \frac{\partial}{\partial \mu} \frac{\Omega_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})}{\mathcal{N}} \quad (4.13)$$

для намагніченості на один вузол $m(T, h)$,

$$\frac{S_{\text{lm}}(T, h, N)}{N} = \frac{1}{2} \frac{S_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})}{\mathcal{N}} \quad (4.14)$$

для ентропії на один вузол $s(T, h)$,

$$\frac{C_{\text{lm}}(T, h, N)}{N} = \frac{1}{2} \frac{C_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})}{\mathcal{N}} \quad (4.15)$$

для теплоємності на один вузол $c(T, h)$. Зазначимо, що h і μ пов'язані таким чином: $\mu = h_{\text{sat}} - h$. Величини для жорстких шестикутників у правій частині

рівнянь (4.12) – (4.15) залежать тільки від температури і хімічного потенціалу через активність $z = \exp(\mu/T)$. Це означає, що для фрустрованої квантової системи всі термодинамічні величини залежать від температури й магнітного поля лише через величину $x = (h_{\text{sat}} - h)/T = \ln z$. Тобто, в цьому режимі з’являється універсальна поведінка термодинамічних величин.

Щоб перевірити формули для термодинамічних величин, які задані в рівняннях (4.12) – (4.15), ми порівняємо дані точної діагоналізації для вихідної спінової моделі з передбаченнями, отриманими на основі картини жорстких шестикутників. Покладемо $J_1 = 1$, $J_2 = 5$ і виконаємо точну діагоналізацію, порахувавши термодинамічні функції фрустрованої квантової спінової системи з $N = 24$ вузлами [87] (див. рис. 4.4). Також проведемо розрахунки для відповідних систем $\mathcal{N} = 12$ вузлів із жорсткими шестикутниками.

Результати температурної залежності теплоємності в околі поля насичення представлені на рисунках 4.6 і 4.7. Як можна побачити з цих рисунків, кар-

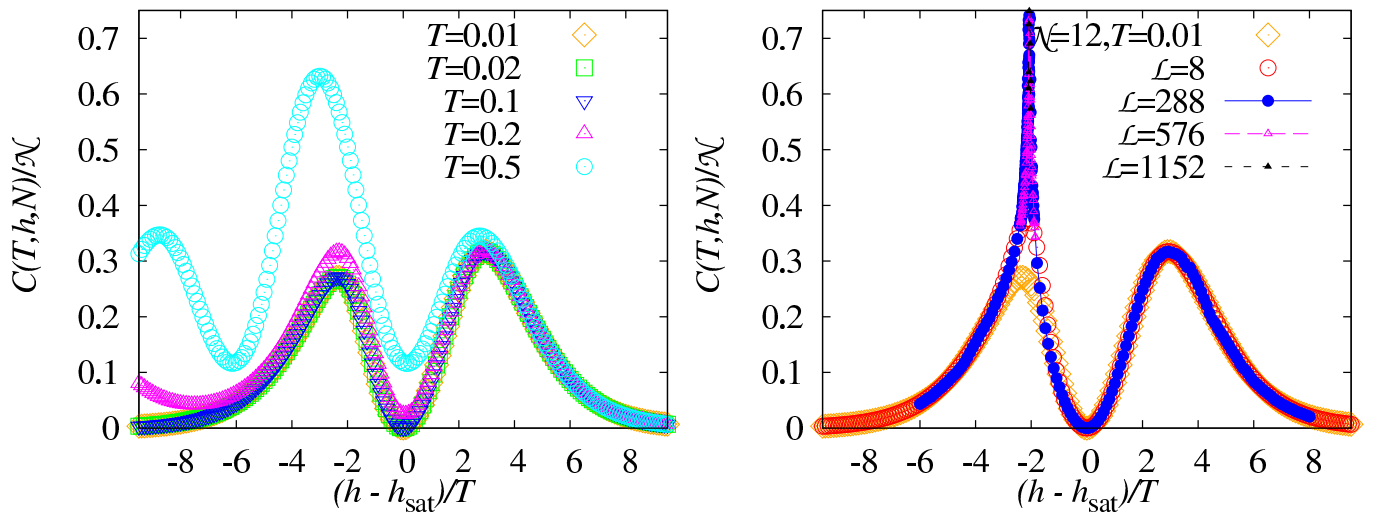


Рис. 4.6. Залежність теплоємності від магнітного поля при низьких температурах. Ліва панель: дані точної діагоналізації для $J_1 = 1$, $J_2 = 5$, $N = 24$ ($\mathcal{N} = 12$). Результати для $T = 0.01, 0.02, 0.1$ майже невідрізненні. Результати для $T = 0.2$ і $T = 0.5$ починають відхилятися від універсальної залежності від $(h - h_{\text{sat}})/T$. Права панель: дані точної діагоналізації для $\mathcal{N} = 12$ (ромбики) і класичного Монте Карло для $\mathcal{N} = \mathcal{L}^2$ з $\mathcal{L} = 288, 576, 1152$. Кільця відповідають прямому розрахунку для жорстких шестикутників на шестикутній ґратці з $\mathcal{N} = 64$.

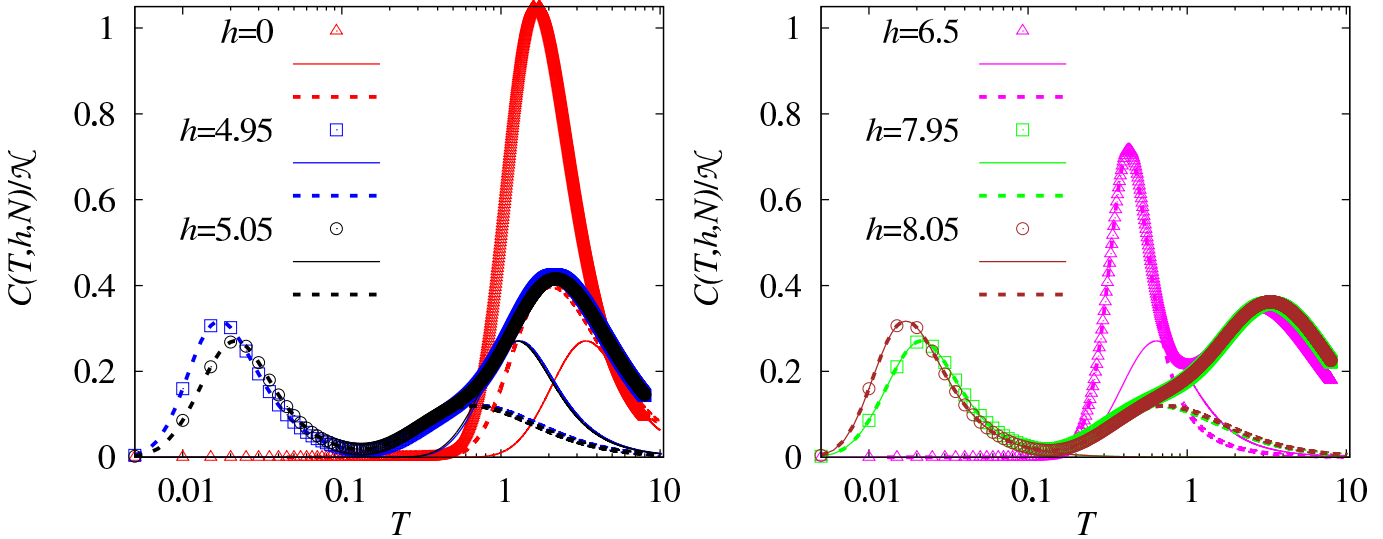


Рис. 4.7. Температурна залежність теплоємності $C(T, h, N)/\mathcal{N}$ для $J_1 = 1$, $J_2 = 5$. Ліва панель: $h = 0$ (червоний), $h = 4.95$ (синій) і $h = 5.05$ (чорний). Права панель: $h = 6.5$ (пурпурний), $h = 7.95$ (зелений) і $h = 8.05$ (коричневий). Дані точної діагоналізації (символи) отримані для ґратки з $N = 24$ вузлами. Передбачення жорстких шестикутників (4.15), (4.11) представлені суцільними тонкими лініями. Передбачення моделі ґраткового газу (4.19) представлені штриховими товстими лініями.

тина жорстких шестикутників чудово відтворює низькотемпературні особливості фрустрованої квантової спінової моделі в околі поля насичення. Відхилення від передбачень моделі жорстких об'єктів на лівій панелі рисунка 4.6 стають помітними лише при $T = 0.2$. Із правої панелі рисунка 4.7 можна зробити висновок, що температурні криві теплоємності при $h = 7.95$ і $h = 8.05$ добре описуються моделлю жорстких об'єктів аж до $T = 0.1$.

Використовуючи відповідність між фрустрованою квантовою спіновою моделлю і класичною моделлю ґраткового газу жорстких об'єктів, можна отримати деякі передбачення для вихідної моделі на основі аналізу ефективної моделі. Наприклад, можна розрахувати ентропію основного стану при полі насичення:

$$\frac{S(T \rightarrow 0, h = h_{\text{sat}}, N)}{2\mathcal{N}} = \frac{\ln \Xi_{\text{hc}}(z = 1, \mathcal{N})}{2\mathcal{N}} \approx 0.218. \quad (4.16)$$

Це число одержується за допомогою прямих розрахунків для скінченних ґраток до $\mathcal{N} = 64$ вузлів. З іншого боку, для проблеми жорстких шестикутників на шестикутній ґратці $\kappa = \exp[\ln \Xi_{\text{hc}}(z = 1, \mathcal{N})/\mathcal{N}] = 1.546 \dots$ відіграє таку ж роль,

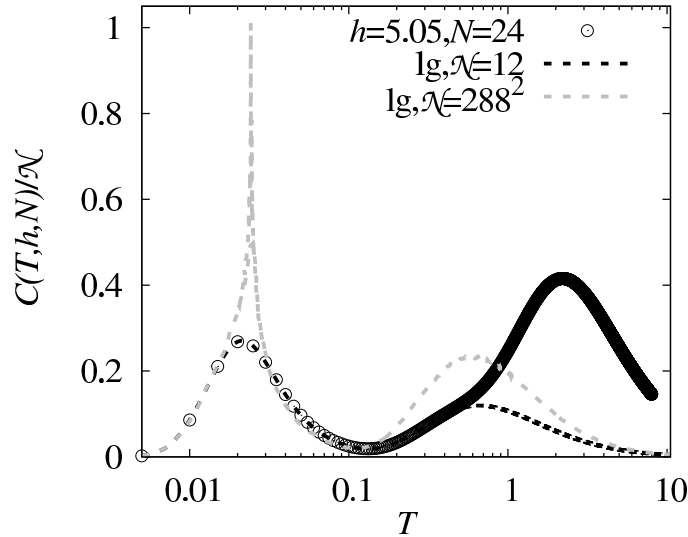


Рис. 4.8. Температурна залежність теплоємності $C(T, h, N)/\mathcal{N}$ для $J_1 = 1$, $J_2 = 5$ і $h = 5.05$. На рисунку дані точної діагоналізації для ґратки з $N = 24$ вузлами представлені кільцями, а передбачення моделі ґраткового газу (4.19) штриховою товстою лінією. Дані Монте Карло для моделі ґраткового газу з 288×288 вузлів представлені штриховою сірою лінією.

що й ентропійна константа жорстких квадратів $\kappa = 1.503048082 \dots$ для жорстких квадратів на квадратній ґратці чи ентропійна константа жорстких шестикутників $\kappa = 1.395485972 \dots$ для жорстких шестикутників на трикутній ґратці [96–98]. Такі константи визначають асимптотичний ріст і є також областю зацікавлення в комбінаториці. Більш точне значення цієї константи для жорстких шестикутників на шестикутній ґратці можна віднайти у [99].

Найцікавішим наслідком відповідності між фрустрованою квантовою двошаровою ґраткою і ґратковим газом жорстких об'єктів є існування фазового переходу лад-безлад. Загальновідомо, що для моделі ґраткового газу на шестикутній ґратці з виключенням перших сусідів, жорсткі шестикутники спонтанно заселяють одну з двох підґраток шестикутної ґратки, коли активність z досягає критичного значення $z_c = 7.92 \dots$ [99]. На мові вихідної фрустрованої квантової спінової моделі, це відповідає впорядкуванню локалізованих магнонів, коли їхня густина зростає. Це відбувається при низьких температурах нижче поля насичення. Оскільки $\ln z_c = (h_{\text{sat}} - h)/T_c$, то для фіксованого (малого) відхилення від

поля насичення $h_{\text{sat}} - h$ формула для критичної температури T_c визначається так:

$$T_c = \frac{h_{\text{sat}} - h}{\ln z_c} \approx \frac{h_{\text{sat}} - h}{\ln 7.92} \approx 0.48 (h_{\text{sat}} - h). \quad (4.17)$$

Критична поведінка належить класу універсальності двовимірної моделі Ізинга [100, 101]. Це означає, що теплоємність при T_c (4.17) має логарифмічну сингулярність. Звичайно, розрахована T_c (4.17) має бути малою. В іншому випадку розроблена ефективна низькоенергетична теорія перестане працювати (див. рис. 4.6 і 4.7).

4.3. За межами концепції незалежних локалізованих магنونів

4.3.1. Інші взаємодіючі локалізовані магнони

Виходячи з праць [17, 18, 93], крім станів незалежних локалізованих магنونів (які задовольняють правило жорстких шестикутників), можна також взяти до уваги вклад у статистичну суму й від інших локалізованих магنونів, які відповідають перекриванню станів шестикутників (тобто, порушують правило жорстких шестикутників); про ці власні стани гамільтоніана (4.1) вже йшла мова в підрозділі 4.1. Відповідний гамільтоніан ґраткового газу має таку форму:

$$\mathcal{H}(\{n_m\}) = -\mu \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} n_m + V \sum_{\langle mn \rangle} n_m n_n. \quad (4.18)$$

Тут $n_m = 0, 1$ — число заповнення на вузлі m ($m = 1, \dots, \mathcal{N}$) допоміжної шестикутної ґратки. Перша (друга) сума в (4.18) пробігає всі вузли (зв'язки між найближчими сусідами) цієї допоміжної ґратки і $\mu = h_{\text{sat}} - h$, $V = J_1$. Взаємодія описує збільшення енергії на V , якщо два сусідні вузли заселені шестикутниками. В границі $V \rightarrow \infty$ правило жорстких шестикутників відновлюється.

Статистична сума, яка містить вклад і від незалежних локалізованих, і від взаємодіючих локалізованих магنونів, задається виразом

$$Z_{\text{LM}}(T, h, N) = \exp \left(-\frac{E_{\text{FM}} - h \frac{N}{2}}{T} \right) \Xi_{\text{lg}}(T, \mu, \mathcal{N}),$$

$$\Xi_{\text{lg}}(T, \mu, \mathcal{N}) = \sum_{n_1=0,1} \dots \sum_{n_{\mathcal{N}}=0,1} \exp \left[-\frac{\mathcal{H}(\{n_m\})}{T} \right]. \quad (4.19)$$

Оскільки Z_{LM} містить не тільки вклад від незалежних локалізованих магнонів, але й від станів, де локалізовані магнони є сусідами, то така статистична сума добре працює в значно ширшій області магнітних полів і температур.

Очевидно, що в рівняння (4.18) і (4.19) можуть бути введені нові змінні Ізинга $\sigma_m = 2n_m - 1$. В результаті отримуємо антиферромагнітну модель Ізинга на шестикутній ґратці в однорідному магнітному полі:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \mathcal{N} \left(-\frac{\mu}{2} + \frac{3V}{8} \right) - \Gamma \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \sigma_m + \mathcal{J} \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_m \sigma_n, \\ \Gamma &= \frac{\mu}{2} - \frac{3V}{4}, \quad \mathcal{J} = \frac{V}{4} > 0. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Змінна Ізинга σ_m набуває двох значень ± 1 , взаємодія найближчих сусідів $\mathcal{J} = J_1/4 > 0$ є антиферромагнітною, а ефективне магнітне поле $\Gamma = (h_{\text{sat}} - h)/2 - 3J_1/4 = (J_2 + 3J_1/2 - h)/2$ дорівнює нулю, коли $h = J_2 + 3J_1/2$. Випадок нульового поля (тобто, $\Gamma = 0$) розв'язується точно [102]. Наприклад, відомо, що критична температура є $T_c/J_1 = 1/[2 \ln(2 + \sqrt{3})] \approx 0.380$. Антиферромагнітний порядок основного стану в моделі (4.20) виживає при $T = 0$ у малих полях $|\Gamma| < 3\mathcal{J}$, тобто, для $h_2 < h < h_{\text{sat}}$, $h_2 = J_2$, $h_{\text{sat}} = J_2 + 3J_1$. Антиферромагнітна модель Ізинга на шестикутній ґратці в однорідному магнітному полі була об'єктом вивчення в кінці двадцятого століття [89, 103–107]. Зокрема, було отримано декілька виразів для критичної лінії в площині "магнітне поле – температура", які є у добрій згоді з числовими результатами [89, 103–105] і [106, 107]. На основі цих виразів можна побудувати фазову діаграму (див. рис. 4.9). Тут використано два вирази для критичної лінії для антиферромагнітної моделі Ізинга в магнітному полі [89, 103–105], які є невідрізненні в масштабі, використаному на рисунку 4.9. Хоча двовимірною модель Ізинга в зовнішньому магнітному полі не розв'язана аналітично, результати отримані в працях [89, 103–105] є дуже точними [89, 105–107].

На рисунку 4.7 представлена теплоємність у широкому діапазоні магнітних полів. Порівняння з даними точної діагоналізації показує явне покращення опи-

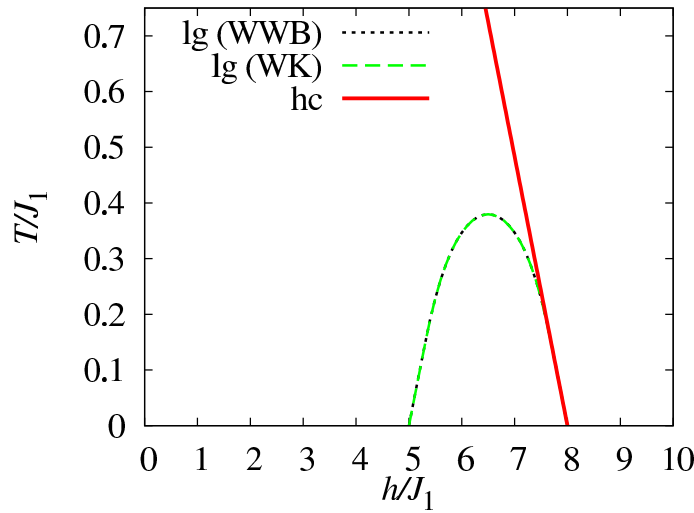


Рис. 4.9. Фазова діаграма фрустрованого спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнетика Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці у площині "магнітне поле – температура". Координати найвищої точки купола: $h/J_1 = J_2/J_1 + 3/2$ і $T_c/J_1 = 1/[2 \ln(2 + \sqrt{3})] \approx 0.380$. Купол торкається горизонтальної осі в точках $h_2/J_1 = J_2/J_1$ і $h_{\text{sat}}/J_1 = J_2/J_1 + 3$. Пунктирна чорна й штрихова зелена лінії відповідають (приблизно, але дуже точно) виразам із праць [89, 103–105] (їх не можна розрізнити в масштабі цього графіка).

су з допомогою жорстких шестикутників після використання моделі ґраткового газу (4.19). Також на рисунку 4.8 представлені дані симуляцій методом класичного Монте Карло для $h = 5.05$ [модель ґраткового газу (4.19)], які показують як змінюється температурна залежність $C(T, h, N)/\mathcal{N}$ і розвивається логарифмічна сингулярність із збільшенням розміру системи (див. $C(T, h, N)/\mathcal{N}$ для $\mathcal{N} = 288^2$ на рисунку 4.8).

4.3.2. Відхилення від ідеальної плоскостонної геометрії

Виходячи з розгляду, запропонованого в працях [108, 109], можна побудувати ефективний низькоенергетичний опис, коли умови плоскостонності трохи порушені, й колишня плоска зона набуває малої дисперсії. Тепер вважатимемо, що взаємодія найближчих сусідів у окремому шарі J_1 і фрустрована взаємодія між шарами J_x є різними, але ця різниця є малою: $|J_1 - J_x|/J_2 \ll 1$. Як і раніше, J_2 — найбільша обмінна взаємодія. Тоді, в режимі сильних полів і низьких тем-

ператур є два істотні стани на кожному димері: $|u\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ (поляризований стан) і $|d\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ (локалізований магнон). Їхні енергії $\epsilon_u = J_2/4 - h$ і $\epsilon_d = -3J_2/4$ збігаються при $h = h_0 = J_2$. Цей $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений набір основних станів при $h = h_0$ розщеплюється збуренням, яке складається з доданка Зеємана $-(h - h_0) \sum_i s_i^z$ і міждимерних взаємодій із константами зв'язку J_1 і J_X . Ефективний гамільтоніан, який діє в просторі основних станів, можна знайти за допомогою теорії збурень [85, 86]:

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\phi_\alpha\rangle \langle \phi_\alpha|}{\epsilon_0 - \epsilon_\alpha} VP + \dots \quad (4.21)$$

Тут $P = |\varphi_0\rangle \langle \varphi_0|$ — проектор на простір основних станів, $|\varphi_0\rangle = \prod_{m=1}^{\mathcal{N}} |v\rangle_m$, де $|v\rangle$ є або стан $|u\rangle$, або стан $|d\rangle$. Проектор P можна переписати як $P = \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} (|u\rangle \langle u| + |d\rangle \langle d|)_m$. Обмежимося першим доданком у рівнянні (4.21):

$$H_{\text{eff}} \approx PHP = PH_0P + PVP. \quad (4.22)$$

Після простих розрахунків і введення псевдоспінових операторів

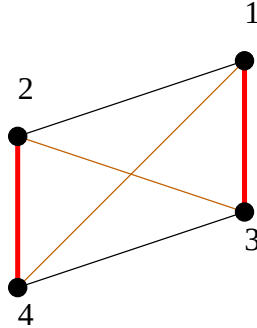


Рис. 4.10. Допоміжна ілюстрація для обчислення PVP .

$$\begin{aligned} T^z &= (|u\rangle \langle u| - |d\rangle \langle d|)/2, \\ T^+ &= |u\rangle \langle d|, \\ T^- &= |d\rangle \langle u| \end{aligned} \quad (4.23)$$

на кожному вертикальному зв'язку для основної частини одержуємо:

$$PH_0P = P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left[|u\rangle \left(\frac{1}{4} J_2 - h_0 \right) \langle u| + |d\rangle \left(-\frac{3}{4} J_2 \right) \langle d| \right]_{\mathbf{m}} P$$

$$= \mathcal{N} \left(-\frac{J_2}{4} - \frac{h_0}{2} \right) - \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} (h_0 - J_2) T_m^z. \quad (4.24)$$

А для частини, що відповідає збуренню, проведемо такі розрахунки:

$$\begin{aligned} V_{4,3} &= J_1 \left(\frac{1}{2} (s_4^+ s_3^- + s_4^- s_3^+) \right) + s_4^z s_3^z; \\ PV_{4,3}P &= P \left[|u\rangle_{\mathbf{m}} |u\rangle_{\mathbf{m}+1} \frac{J_1}{4} \langle u|_{\mathbf{m}+1} \langle u|_{\mathbf{m}} + |u\rangle_{\mathbf{m}} |d\rangle_{\mathbf{m}+1} \frac{J_1}{4} \langle d|_{\mathbf{m}+1} \langle u|_{\mathbf{m}} \right. \\ &\quad \left. + |d\rangle_{\mathbf{m}} |u\rangle_{\mathbf{m}+1} \frac{J_1}{4} \langle u|_{\mathbf{m}+1} \langle d|_{\mathbf{m}} \right] P = P \frac{J_1}{4} \left[\left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}+1}^z \right) \right. \\ &\quad \left. + T_{\mathbf{m}+1}^- T_{\mathbf{m}}^+ + T_{\mathbf{m}+1}^+ T_{\mathbf{m}}^- \right] P; \\ PV_{4,1}P &= P \frac{J_X}{4} \left[\left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}+1}^z \right) - T_{\mathbf{m}+1}^- T_{\mathbf{m}}^+ - T_{\mathbf{m}+1}^+ T_{\mathbf{m}}^- \right] P. \end{aligned} \quad (4.25)$$

(Для кращого розуміння позначень $PV_{4,3}P$ і $PV_{4,1}P$ див. рис. 4.10.) Тепер на кожному вертикальному зв'язку для збурення маємо:

$$\begin{aligned} PVP &= 3 \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{J_1 + J_X}{16} + \frac{J_1 + J_X}{4} T_m^z \right) + \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(-\frac{h}{2} + \frac{h_0}{2} - (h - h_0) T_m^z \right) \\ &\quad + 2 \sum_{\langle mn \rangle} \left(\frac{J_1 + J_X}{4} T_m^z T_n^z + \frac{J_1 - J_X}{2} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) \right). \end{aligned} \quad (4.26)$$

В кінцевому результаті отримуємо:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \mathcal{N} \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3J}{8} \right) - \mathfrak{h} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \sum_{\langle mn \rangle} [\mathfrak{J}^z T_m^z T_n^z + \mathfrak{J} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y)], \\ \mathfrak{h} &= h - J_2 - \frac{3J}{2}, \quad J = \frac{J_1 + J_X}{2}, \quad \mathfrak{J}^z = J, \quad \mathfrak{J} = J_1 - J_X. \end{aligned} \quad (4.27)$$

Друга сума в рівнянні (4.27) пробігає всі $3\mathcal{N}/2$ зв'язків найближчих сусідів на допоміжній шестикутній ґратці. Зазначимо, що знак константи взаємодії $\mathfrak{J}$ не є важливим, оскільки модель на допоміжній ґратці (4.27) є двопідґратковою і знак обмінної взаємодії можна змінити відповідним поворотом осей координат у спіновому просторі на одній з підґраток. Ефективний гамільтоніан (4.27), який відповідає спин-1/2 XXZ моделі Гайзенберга на шестикутній ґратці в полі прикладеному вздовж осі z , є набагато простішим за гамільтоніан початкової моделі

і може бути вивченим далі за допомогою, наприклад, методу квантового Монте Карло [110, 111].

Для ідеальної плоскостонної геометрії (випадок ідеальної фрустрації) ефективний гамільтоніан (4.27) переходить у вищевізану модель ґраткового газу чи Ізинга, див. формули (4.18) і (4.20). Для підтвердження цього потрібно взяти до уваги, що $J = J_1 = V$, $h = h - h_{\text{sat}} + 3J/2 = -\mu + 3V/2$, $J^z = J_1 = V$, $J = 0$ і замінити T^z на $-\sigma/2$:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \mathcal{N} \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3V}{8} \right) - \left(\frac{\mu}{2} - \frac{3V}{4} \right) \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \sigma_m + \frac{V}{4} \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_m \sigma_n \\ &= E_{\text{FM}} - h\mathcal{N} + \mathcal{N} \left(-\frac{\mu}{2} + \frac{3V}{8} \right) - \left(\frac{\mu}{2} - \frac{3V}{4} \right) \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \sigma_m + \frac{V}{4} \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_m \sigma_n, \end{aligned} \quad (4.28)$$

що збігається з рівнянням (4.20).

Для того, щоб проілюструвати якість ефективного опису на основі H_{eff} (4.27), порівнюємо результати для кривої намагнічення в основному стані, отримані методом точної діагоналізації для початкової фрустрованої моделі з $N = 32$ вузлами [суцільні тонкі криві (див. рис. 4.11)] і для ефективної нефрустрованої моделі з $\mathcal{N} = 16$ вузлами [штрихові тонкі криві (див. рис. 4.11)].

Як можна побачити на рисунку 4.11, стрибки намагніченості виживають навіть для досить значних відхилень від випадку ідеальної фрустрації. Природа стрибка є очевидною з ефективної моделі (4.27). Це спін-флоп перехід, який присутній у двовимірному ізингоподібному XXZ антиферромагнетика Гайзенберга в зовнішньому полі вздовж осі легкого намагнічення [112–114]. Відповідно до рівняння (4.27) ефективна XXZ модель із віссю легкого намагнічення стає ізотропною, коли $J_1 + J_x = 2(J_1 - J_x)$, тобто, спін-флоп перехід зникає зі зростанням відхилення від випадку ідеальної фрустрації $J_1 = J_x$.

Тут доречно пригадати, що спін-флоп перехід на квадратній ґратці був вивчений у [112]. Зокрема, там можна знайти залежності висоти стрибка намагніченості й поля переходу від анізотропії. Температурні ефекти можна знайти в [113]. Вважаючи, що для шестикутної ґратки має місце такий самий сценарій, можна

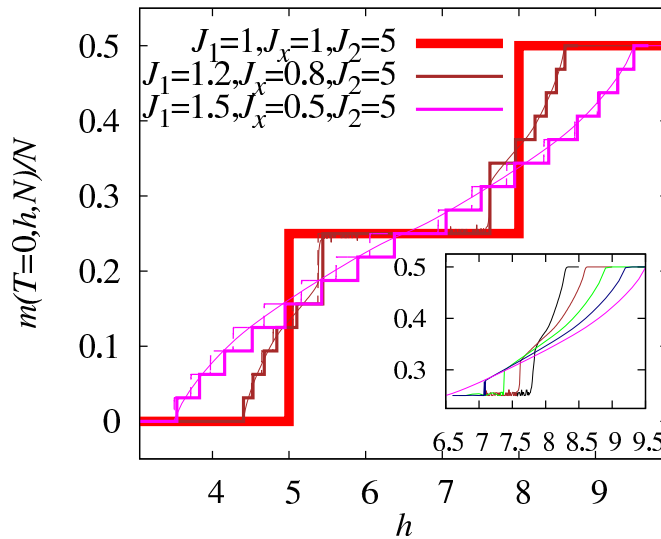


Рис. 4.11. Криві намагніченості при нульовій температурі для спин-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на шестикутній двохшаровій ґратці. Результати точної діагоналізації та симуляцій методом квантового Монте Карло. Суцільна товста червона лінія відповідає випадку ідеальної фрустрації $J_X = J_1 = 1$, $J_2 = 5$. Тонкі лінії [точна діагоналізація для повної моделі з $N = 32$ вузлами (суцільні) і для відповідної ефективної XXZ моделі з $\mathcal{N} = 16$ вузлами (штрихові)] і дуже тонкі лінії (квантове Монте Карло для $\mathcal{N} = 2304$) відповідають відхиленню від випадку ідеальної фрустрації: $J_1 = 1.2$, $J_X = 0.8$ і $J_1 = 1.5$, $J_X = 0.5$, а $J_2 = 5$. Зазначимо, що для $J_1 = 1.2$, $J_X = 0.8$ дані точної діагоналізації для повної моделі і для відповідної ефективної моделі майже збігаються. У вставці показано окремо більше даних квантового Монте Карло ($\mathcal{N} = 2304$) для $J_1 - J_X = 0.2$ (чорна), $J_1 - J_X = 0.4$ (коричнева), $J_1 - J_X = 0.6$ (зелена), $J_1 - J_X = 0.8$ (темно-синя) і $J_1 - J_X = 1$ (пурпурна).

очікувати, що спин-флоп перехід у нашій моделі зникає лише в ізотропній точці $J_1 + J_X = 2(J_1 - J_X)$. Дані обчислень методом квантового Монте Карло, представлені у вставці на рисунку 4.11, підтверджують цей висновок.

4.4. Магнетотермодинаміка. Точна діагоналізація та квантове Монте Карло

Повернімося до початкової моделі (4.1) і розгляньмо детальніше не тільки випадок $T = 0$, але й випадок ненульових (низьких) температур. Розпочнімо з тестування точності опису за допомогою ефективної моделі (4.27). Розгляньмо

повну початкову модель (4.1) на скінченній двошаровій ґратці з $N = 24$ вузлами (див. рис. 4.4) і виконаймо розрахунки методом точної діагоналізації [87], щоб отримати термодинамічні величини. Потім порівняймо їх із результатами точної діагоналізації для відповідної ефективної моделі (4.27) з $\mathcal{N} = 12$ вузлами. Для конкретності зафіксуємо такий набір параметрів: $J_2 = 5$ і $J_1 = 1.1$ $J_X = 0.9$.

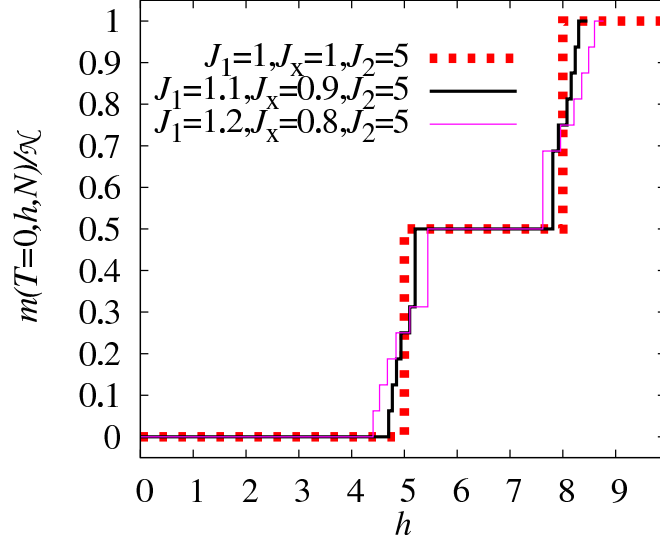


Рис. 4.12. Дані точної діагоналізації для кривої намагніченості основного стану скінченної шестикутної двошарової ґратки з $N = 32$ вузлами для моделі (4.1) з $J_2 = 5$ і $J_1 = J_X = 1$ (штрихова товста червона лінія), $J_1 = 1.1$, $J_X = 0.9$ (суцільна тонка чорна лінія), $J_1 = 1.2$, $J_X = 0.8$ (суцільна дуже тонка пурпурна лінія).

Перш за все розглянемо криву намагніченості $M(T, h)$ при нульовій температурі (див. рис. 4.12, а також рис. 4.11). У випадку ідеальної фрустрації, тобто $J_1 = J_X = 1$, крива $M(h)/\mathcal{N}$ не залежить від розміру системи: M дорівнює нулю поки $h < h_2 = J_2 = 5$, набуває половинного значення від величини насичення, коли $h_2 < h < h_{\text{sat}} = J_2 + 3J_1 = 8$, і досягає насичення для $h > h_{\text{sat}}$. Відхилення від випадку ідеальної геометрії приводять до модифікації в околі h_2 і h_{sat} , проте, широке плато залишається (див. рис. 4.12, а також рис. 4.11).

Далі, представимо температурні залежності намагніченості та теплоємності для магнітних полів в околі поля насичення (див. рис. 4.13). Тут треба прокоментувати застосований нами підхід точної діагоналізації. Повний розмір матриці гамільтоніана для моделі (4.1) зростає, коли S^z спадає до нуля і виходить за межі

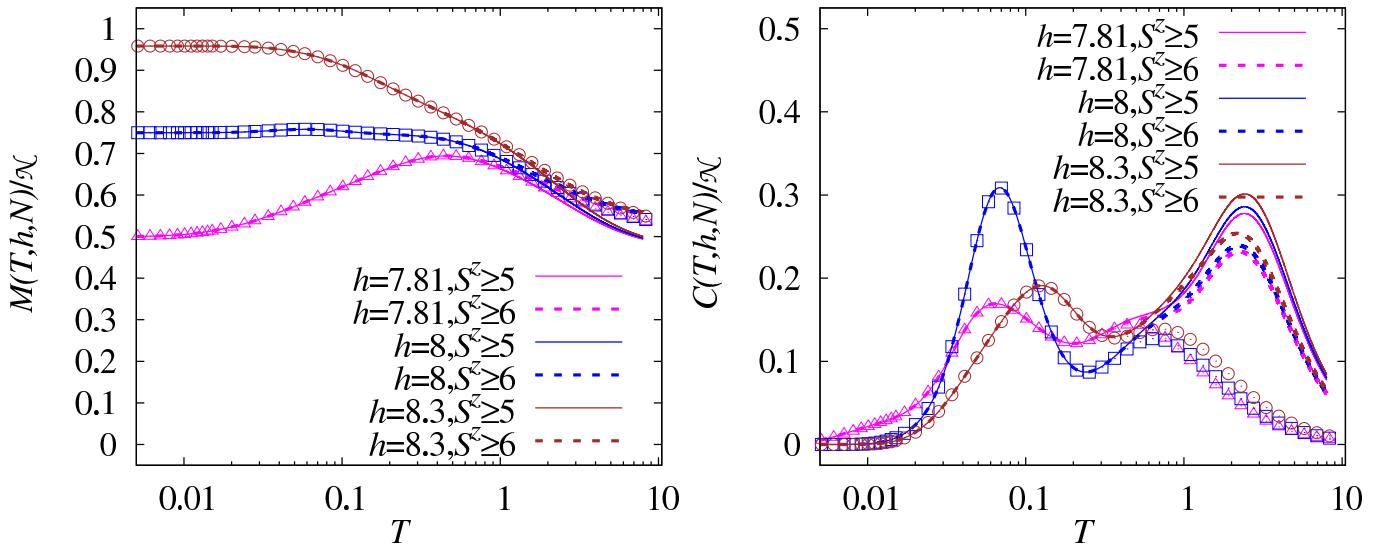


Рис. 4.13. Намагніченість (ліва панель) і теплоємність (права панель) для системи з $J_2 = 5$, $J_1 = 1.1$ і $J_X = 0.9$ при різних полях: $h = 7.81$ (пурпуровий), $h = 8$ (синій) і $h = 8.3$ (коричневий). Результати точної діагоналізації для початкової моделі (4.1) з $N = 24$ вузлами (лінії) порівнюються з результатами точної діагоналізації для ефективної моделі (4.27) з $N = 12$ вузлами (символи).

теперішніх обчислювальних можливостей для $S^z < 5$. Але для системи поблизу поля насичення підпростори з малим значенням S^z стають важливими тільки при високій температурі. Це видно з порівняння результатів (див. рис. 4.13), які враховують підпростори з $S^z = 12, \dots, 5$ (суцільні лінії) і підпростори з $S^z = 12, \dots, 6$ (штрихові лінії). Очевидно, дані точної діагоналізації для початкової моделі (4.1) є надійними принаймні до $T = 0.7$ (див. рис. 4.13). Окрім того, передбачення ефективної моделі (символи) чудово відтворюють низькотемпературні особливості (див. рис. 4.13) для температур аж до $T = 0.5$. Зрозуміло, що температурна область, у якій ефективна модель є точною, залежить від значень J_2 , J_1 , J_X , і h , проте, твердження, що простіша (нефрустрована) ефективна модель коректно описує низькотемпературні ступені свободи, не становить сумнівів. Щодо температурних кривих $M(T)$ і $C(T)$ (див. рис. 4.13), яскравою особливістю є зростання намагніченості зі збільшенням температури, як це знайдено для магнітних полів трохи нижче h_{sat} . Це пов'язано з великим набором низькоенергетичних станів, які мають більші значення S^z , ніж основний стан, і ці стани стають досяжними, коли

температура зростає. Іншою незвичайною особливістю є подвійний пік у структурі теплоємності. Знову, за це відповідає великий набір низькоенергетичних станів, однак, значення S^z цих станів неважливі для $C(T)$.

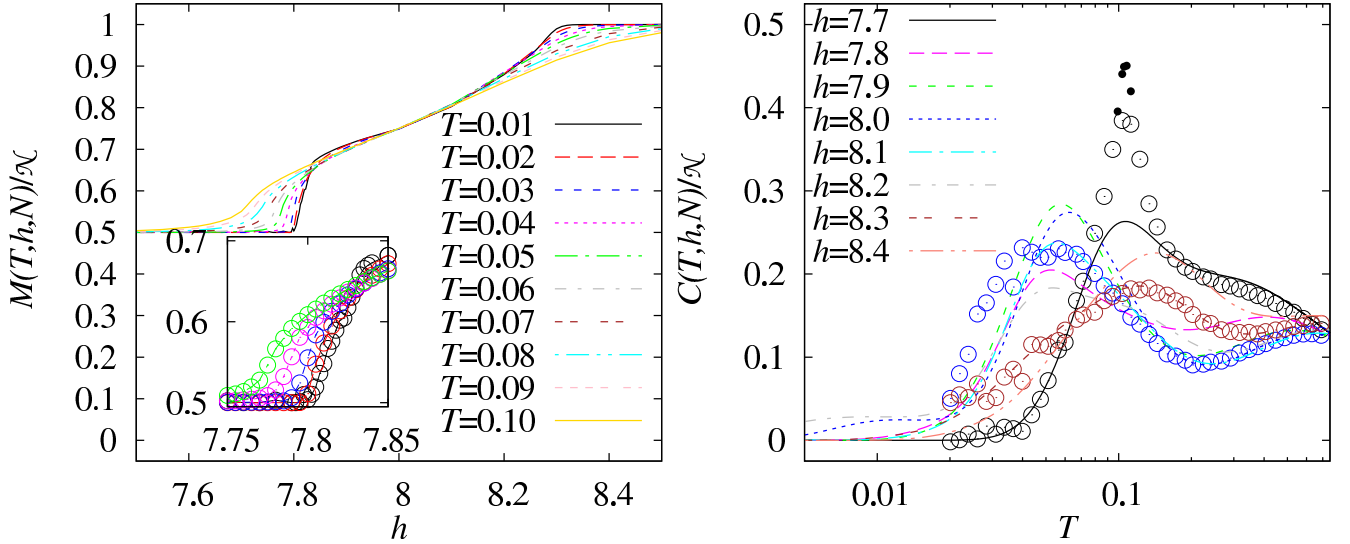


Рис. 4.14. Криві намагніченості при різних температурах (ліва панель) і температурні залежності теплоємності при різних полях (права панель) для $J_2 = 5$, $J_1 = 1.1$ і $J_X = 0.9$, як впливає з симуляцій методом квантового Монте Карло ($\mathcal{N}$ до 2304 для лівої панелі і $\mathcal{N}$ до 1024, кружки на правій панелі) і точної діагоналізації ($\mathcal{N} = 18$, суцільні лінії на правій панелі) для ефективної моделі (4.27). Всі криві $C(T, h, N)/\mathcal{N} \rightarrow 0$ при $T \rightarrow 0$, як це й повинно бути.

Показавши, що ефективна модель добре працює принаймні до $T = 0.5$, виконаймо розрахунки з допомогою методів квантового Монте Карло [110] і точної діагоналізації [87] для (нефрустрованої) ефективної моделі (4.27), розглядаючи набагато більші системи (див. рис. 4.14). Основна особливість кривої намагніченості (див. рис. 4.14) пов'язана зі спін-флоп процесом, який є у моделі (4.27): антиферромагнітно взаємодіючі псевдоспіни різко змінюють свій напрям з паралельно до перпендикулярно орієнтованого відносно осі легкого намагнічення анізотропної XXZ моделі (4.27) при деякому критичному магнітному полі h_c , де h_c є трохи більшим за 7.8 для розглядуваного набору параметрів. Для квантових спінів цей процес вперше обговорив Л. Неель у 1936 році [115]; процес не є тривіальним; він залежить від ґратки, від значення спіну, від температурних флуктуацій і т.д.

Ряд особливостей очевидний із результатів представлених на рисунку 4.14. Таким чином, при достатньо низьких температурах (нижче $T = 0.02$) намагніченість в околі h_c є сильно модифікованою. Але коли температура зростає далі, значення, при якому намагніченість починає швидко рости, стає меншим і нахил кривої намагніченості стає також меншим. Нарешті, намагніченість стає помірно округлою і при достатньо високій температурі (вище $T = 0.1$) не залишається жодних видимих слідів спін-флоп переходу. Температурна залежність теплоємності проявляє низькотемпературний максимум (див. рис. 4.13 і 4.14). У спін-флоп фазі, тобто, між h_c і h_{sat} , збудження є безщілинні, але вони мають щілину при $h < h_c$ і $h > h_{\text{sat}}$. Як результат, криві $C(T, h, N)$ від T проявляють подібну низькотемпературну поведінку для h між h_c і h_{sat} , але відмінну для h поза діапазоном цих полів (низькотемпературний діапазон на рисунку 4.14 є вище $T = 0.02$). Цікаво також порівняти криві $C(T)$ для $h = 7.7$ і $h = 8.0$ (див. рис. 4.14). В той час як перша крива відображає перехід із антиферромагнітної фази до парамагнітної, друга крива відображає перехід із спін-флоп фази до парамагнітної [113]. Помітні ефекти скінченних розмірів для $h = 7.7$ (великі порожні кружечки відповідають $\mathcal{N} = 256$, тоді як малі заповнені кружечки відповідають $\mathcal{N} = 1\,024$) вказують на сингулярність, яка з'являється в термодинамічній границі. І навпаки, керований температурою перехід між спін-флоп фазою та парамагнітною фазою не супроводжується сингулярністю в теплоємності. Очікується, що ці сліди спін-флоп фази можна побачити в початковій моделі в розглядуваному діапазоні параметрів.

4.5. Висновки

У цьому розділі представлено дослідження низькотемпературних властивостей спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двохаровій ґратці у магнітному полі. Для розглянутої моделі побудовано підмножину $2^{\mathcal{N}}$ власних станів ($\mathcal{N} = N/2$) гамільтоніана та розраховано їхній вклад у термодинамічні величини. Показано, що при достатньо сильній взаємодії між шарами, ці стани є низькоенергетичними для сильних та помірних полів, тому вони

домінують у термодинамічних властивостях.

Найцікавішими властивостями вивченої фрустрованої квантової спінової моделі є: стрибки намагніченості та широке плато, залишкова ентропія основного стану, додатковий низькотемпературний пік у температурній залежності теплоємності в околі поля насичення і фазовий перехід лад-безлад при скінченній температурі, що належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. Для ізотропної моделі Гайзенберга у випадку відхилень від ідеальної фрустрації, виявлено стрибки намагніченості, які можна пояснити як спін-флоп переходи у ефективній моделі.

Дослідження може застосуватися для магнітної сполуки $\text{V}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Найбільш інтригуюче питання: чи може фазова діаграма (див. рис. 4.9) бути виявлена експериментально? Потрібно зауважити, що обмінні взаємодії для $\text{V}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ досі обговорюються [50, 63] і може скластися так, що значення J_2 не буде достатньо сильним для того, щоб у цій сполуці реалізувався описаний сценарій, зумовлений локалізованими магнонами. Результати цього розділу опубліковано в статтях [21, 22].

РОЗДІЛ 5

КВАНТОВА СПІНОВА ТРИКУТНА ДВОШАРОВА ҐРАТКА У МАГНІТНОМУ ПОЛІ ТА МОДЕЛЬ ШЕСТИКУТНИКІВ БЕКСТЕРА

У цьому розділі представлено дослідження трикутної двошарової ґратки. На ґратці розглянуто квантову спінову модель Гайзенберга при наявності фрустрованих міждимерних взаємодій. Проводиться вивчення двох різних випадків, коли є феромагнітні міждимерні взаємодії та, коли є антиферомагнітні міждимерні взаємодії. Для дослідження моделі застосовано підхід, який ґрунтується на теорії локалізованих магнонів [5, 80, 82, 83, 90, 91]. Такий підхід надає можливість отримати низькотемпературні термодинамічні характеристики системи.

Основним результатом, який отримано під час вивчення такої системи, є фазові діаграми "магнітне поле – температура". У випадку антиферомагнітних міждимерних взаємодій виявлено фазовий перехід лад-безлад, що належить до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса, а у випадку феромагнітних міждимерних взаємодій виявлено фазовий перехід першого роду, який при певній температурі переходить у фазовий перехід другого роду, що належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. Матеріал цього розділу опубліковано в статті [25].

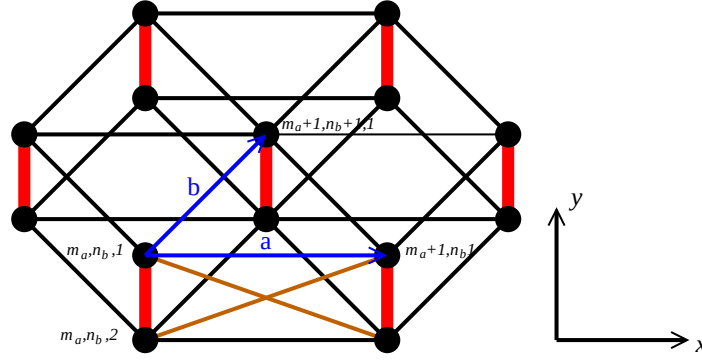


Рис. 5.1. Фрустрований трикутний двошар. $\mathbf{a}$ і $\mathbf{b}$ — базисні вектори трикутної ґратки, а цілі числа m_a і m_b визначають розташування елементарної комірки. Вертикальні (червоні) зв'язки мають константу взаємодії J_2 . Зв'язки найближчих сусідів у окремому шарі (чорні) мають константу взаємодії J_1 . Фрустровані зв'язки між шарами (коричневі) мають константу взаємодії J_X .

5.1. Спінова модель та її одномагнетонний спектр

У цьому розділі розглядається квантова спінова модель Гайзенберга з гамільтоніаном

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \quad S^z = \sum_i s_i^z \quad (5.1)$$

на трикутній двошаровій ґратці, яка складається з $N = 2\mathcal{N}$ вузлів (див. рис. 5.1). Перша сума в рівнянні (5.1) пробігає всі зв'язки ґратки, а сума за i означає сумування за всіма вузлами ґратки. Далі, J_{ij} набуває трьох різних значень: $J_2 > 0$ (димерні зв'язки), J_1 (зв'язки найближчих сусідів у окремому шарі) і J_X (фрустровані зв'язки між шарами) (див. рис. 5.1). Важливий випадок ідеальної фрустрації, коли константи обмінної взаємодії $J_1 = J_X$. Крім того $J_1 = J_X$ може бути як більше нуля (антиферромагнітний випадок для міждимерних взаємодій), так і менше нуля (ферромагнітний випадок для міждимерних взаємодій).

Оскільки z компонента повного спіну S^z комутує з гамільтоніаном системи H (5.1), то можна розглядати підпростори з різними значеннями S^z окремо. У режимі сильних магнітних полів низькотемпературна поведінка системи зумовлена перш за все підпросторами з великими S^z . Розгляньмо випадок $J_X = J_1$ ("випадок

ідеальної фрустрації"). Єдиний стан із $S^z = N/2$ є повністю поляризований стан $|\dots \uparrow \dots\rangle$ з енергією $E_{\text{FM}} = N(J_2/8 + 3J_1/2)$.

Розрахуємо одномагнонний енергетичний спектр системи. Для знаходження енергії магнона виберемо систему координат як на рисунку 5.1 і введемо вектори **a** та **b**. Елементарна комірка містить окремий димер. Введемо $\mathcal{N} = N/2$ — число вертикальних зв'язків (димерів) у двошарі. Для розрахунку спектру одномагнонних збуджень використаємо перетворення Гольштайна-Примакова [92]:

$$\begin{aligned} s_i^+ &= \sqrt{2s} \sqrt{1 - \frac{1}{2s} b_i^\dagger b_i b_i} = \sqrt{2s} \left(1 - \frac{1}{4s} b_i^\dagger b_i + \dots \right) b_i \approx \sqrt{2s} b_i, \\ s_i^- &= \sqrt{2s} b_i^\dagger \sqrt{1 - \frac{1}{2s} b_i^\dagger b_i} = \sqrt{2s} b_i^\dagger \left(1 - \frac{1}{4s} b_i^\dagger b_i + \dots \right) \approx \sqrt{2s} b_i^\dagger, \\ s_i^z &= s - b_i^\dagger b_i. \end{aligned} \quad (5.2)$$

Нас цікавить тільки одномагнонний випадок, тому виписаний у (5.2) лише перший доданок ряду буде точним (див. також підрозділ 4.1).

Через $A_{m_a, m_b}^1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger})$ і $A_{m_a, m_b}^2(A_{m_a, m_b}^{2\dagger})$ позначимо оператори в елементарній комірниці на вузлах першого та другого шарів відповідно. Після виконання очевидних перетворень та підстановки виразів (5.2), гамільтоніан (5.1) набуде вигляду:

$$\begin{aligned} H = \sum_{m_a=1}^{\mathcal{N}} \sum_{m_b=1}^{\mathcal{N}} & [sJ_2(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^2 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^1) + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 \\ & + A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1) + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2 + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) \\ & + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2 + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 \\ & + A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^2) - s\Delta J_2(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) \\ & - 2s\Delta J_1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2 + A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 \\ & + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2) + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b}^1 + A_{m_a+1, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1) \\ & + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b}^2 + A_{m_a+1, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b}^2 \\ & + A_{m_a+1, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2) + sJ_1(A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b}^1 + A_{m_a+1, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1) \\ & - 2s\Delta J_1(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2 + A_{m_a+1, m_b}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b}^1 \\ & + A_{m_a+1, m_b}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b}^2) + sJ_1(A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b}^1 + A_{m_a+1, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& +sJ_1(A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b}^2 + A_{m_a+1, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1) + sJ_1(A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b}^2 \\
& + A_{m_a+1, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2) + sJ_1(A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b}^1 + A_{m_a+1, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2) \\
& - 2s\Delta J_1(A_{m_a, m_b+1}^{1\dagger} A_{m_a, m_b+1}^1 + A_{m_a, m_b+1}^{2\dagger} A_{m_a, m_b+1}^2 + A_{m_a+1, m_b}^{1\dagger} A_{m_a+1, m_b}^1 \\
& + A_{m_a+1, m_b}^{2\dagger} A_{m_a+1, m_b}^2) + h(A_{m_a, m_b}^{1\dagger} A_{m_a, m_b}^1 + A_{m_a, m_b}^{2\dagger} A_{m_a, m_b}^2)]. \quad (5.3)
\end{aligned}$$

Далі, введемо перетворення Фур'є:

$$\begin{aligned}
A_{m_a, m_b}^{1\dagger} &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp[i(k_a m_a + k_b m_b)] A_{\mathbf{k}}^{1\dagger}, \\
A_{m_a, m_b}^1 &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp[-i(k_a m_a + k_b m_b)] A_{\mathbf{k}}^1, \\
A_{m_a, m_b}^{2\dagger} &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp[i(k_a m_a + k_b m_b)] A_{\mathbf{k}}^{2\dagger}, \\
A_{m_a, m_b}^2 &= \frac{1}{\mathcal{L}} \sum_{k_a} \sum_{k_b} \exp[-i(k_a m_a + k_b m_b)] A_{\mathbf{k}}^2. \quad (5.4)
\end{aligned}$$

Застосувавши перетворення (5.4) до гамільтоніана (5.3), отримаємо:

$$\begin{aligned}
H &= \sum_{k_a} \sum_{k_b} [sJ_2(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1) \\
& + sJ_1(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{-ik_b} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{ik_b} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{-ik_b} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{ik_b} \\
& + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{-ik_b} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{ik_b} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{-ik_b} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{ik_b}) \\
& - s\Delta J_2(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2) - 2s\Delta J_1(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 \\
& + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2) + sJ_1(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{-ik_a} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{ik_a} \\
& + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{-ik_a} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{ik_a} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{-ik_a} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{ik_a} \\
& + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{-ik_a} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{ik_a}) - 2s\Delta J_1(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 \\
& + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2) + sJ_1(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{i(k_b-k_a)} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{i(k_a-k_b)} \\
& + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{i(k_b-k_a)} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{i(k_a-k_b)} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{i(k_b-k_a)} + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{i(k_a-k_b)} \\
& + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 e^{i(k_b-k_a)} + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 e^{i(k_a-k_b)}) - 2s\Delta J_1(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2 \\
& + A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2) + h(A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} A_{\mathbf{k}}^1 + A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} A_{\mathbf{k}}^2)]. \quad (5.5)
\end{aligned}$$

Тепер гамільтоніан системи (5.5) можна записати в матричній формі:

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}}^{1\dagger} & A_{\mathbf{k}}^{2\dagger} \end{pmatrix} \mathbf{H} \begin{pmatrix} A_{\mathbf{k}}^1 \\ A_{\mathbf{k}}^2 \end{pmatrix},$$

$$\mathbf{H} = \begin{pmatrix} sJ_1\gamma_{\mathbf{k}} - s\Delta J_2 - 12s\Delta J_1 + h & sJ_2 + sJ_1\gamma_{\mathbf{k}} \\ sJ_2 + sJ_1\gamma_{\mathbf{k}} & sJ_1\gamma_{\mathbf{k}} - s\Delta J_2 - 12s\Delta J_1 + h \end{pmatrix}, \quad (5.6)$$

де $\gamma_{\mathbf{k}}$ має вигляд:

$$\gamma_{\mathbf{k}} = e^{-ik_b} + e^{ik_b} + e^{-ik_a} + e^{ik_a} + e^{i(k_b-k_a)} + e^{i(k_a-k_b)}$$

$$= 2[\cos k_a + \cos k_b + \cos(k_a - k_b)]. \quad (5.7)$$

Нас цікавить випадок $s = 1/2$ (квантовий випадок), коли гамільтоніан системи (5.1) є ізотропний ($\Delta = 1$). У такому випадку матриця $\mathbf{H}$ у (5.6) має такі власні значення:

$$E_1(\mathbf{k}) = h - J_2 - 6J_1,$$

$$E_2(\mathbf{k}) = h - 6J_1 + 2[\cos k_a + \cos k_b + \cos(k_a - k_b)]. \quad (5.8)$$

Значення енергії (5.8) утворюють дві одномагнетонні зони $E_1(\mathbf{k})$ і $E_2(\mathbf{k})$, одна з яких є бездисперсійною (плоскою): $E_1(\mathbf{k})$ не залежить від $\mathbf{k}$, див. рисунки 5.2 і 5.3.

$\mathcal{N}$ станів із плоскої зони можна розглядати як набір локалізованих станів, в яких перевернутий спін знаходиться на одному з $\mathcal{N}$ вертикальних димерів (див. рис. 5.1). Решта $\mathcal{N}$ станів не є локалізованими й розсосереджені на всій ґратці. Як видно з рівняння (5.8), плоска одномагнетонна зона стає найнижчою енергетичною зоною: коли $J_2 > J_{2c} = 3J_1$ (антиферромагнетний випадок для міждимерних взаємодій, $J_1 = J_X > 0$) (див. рис. 5.2) і коли $J_2 > J_{2c} = 6|J_1|$ (ферромагнетний випадок для міждимерних взаємодій, $J_1 = J_X < 0$) (див. рис. 5.3). Тобто, якщо константа взаємодії на вертикальному димері J_2 є достатньо великою, найнижчою одномагнетонною енергетичною зоною є бездисперсійна зона $E_1(\mathbf{k})$. Надалі вважатимемо, що ці нерівності виконуються в обох випадках.

Із одномагнетонного спектру (5.8) також можна одержати значення поля насичення. У випадку антиферромагнетних міждимерних взаємодій для цього скор-

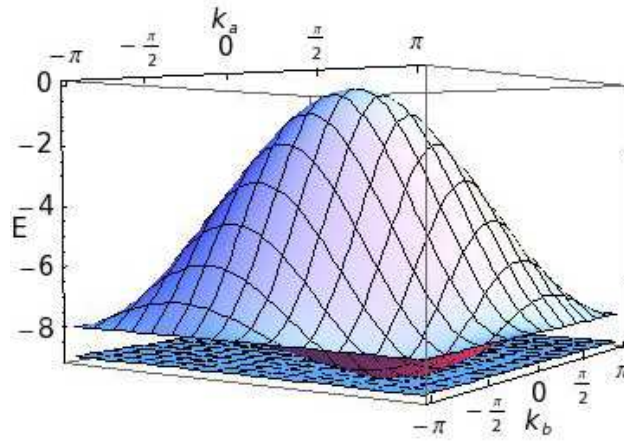


Рис. 5.2. Енергетичний однагнонний спектр трикутної двошарової ґратки (5.8). Тут $J_2 = 3J_1$, $J_1 = J_X = 1$ (антиферромагнітний випадок для міждимерних взаємодій).

стаємося рівністю:

$$E_{0;S^z=\frac{N}{2}-1} - h_{\text{sat}} \left(\frac{N}{2} - 1 \right) = E_{0;S^z=\frac{N}{2}} - h_{\text{sat}} \frac{N}{2};$$

$$E_{FM} + \varepsilon_1 + h_{\text{sat}} = E_{FM}, \quad (5.9)$$

де $\varepsilon_1 = -E_1(\mathbf{k})$ в нульовому магнітному полі. Звідси, $h_{\text{sat}} = J_2 + 6J_1$ (антиферромагнітний випадок для міждимерних взаємодій). Для випадку ферромагнітних міждимерних взаємодій із метою обчислення поля насичення h_{sat} використаємо інше співвідношення:

$$E_{0;S^z=0} - h_{\text{sat}} 0 = E_{0;S^z=\frac{N}{2}} - h_{\text{sat}} \frac{N}{2};$$

$$-\frac{3N}{8} J_2 = E_{FM} - h_{\text{sat}} \frac{N}{2}. \quad (5.10)$$

Звідси, $h_{\text{sat}} = J_2 - 3|J_1|$ (ферромагнітний випадок для міждимерних взаємодій).

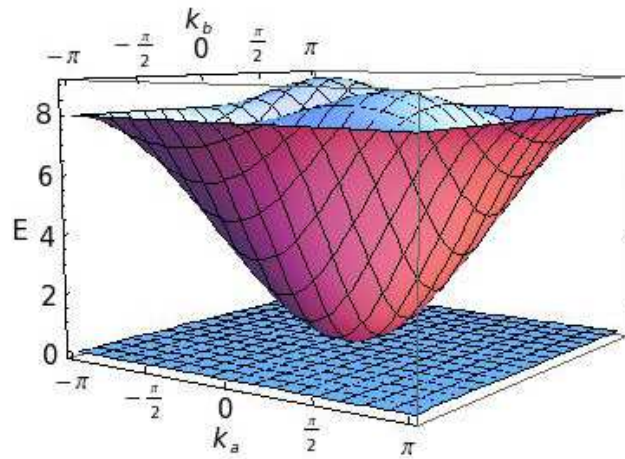


Рис. 5.3. Енергетичний однамагнний спектр трикутної двошарової ґратки (5.8). $J_2 = 6|J_1|$, $J_1 = J_X = -1$ (феромагнітний випадок для міждимерних взаємодій).

5.2. Ефективний гамільтоніан за наявності поля

5.2.1. Ґратковий газ

Крім станів незалежних локалізованих маґнонів, які задовольняють правило жорстких шестикутників на трикутній ґратці, можна також узяти до уваги вклад і від інших локалізованих маґнонів (див. праці [17, 18]), які визначаються перекриттям станів шестикутників (тобто, порушують правило жорстких шестикутників). Запишемо гамільтоніан ґраткового газу, який дозволяє сусіднім димерам бути заповненими локалізованими маґнонами:

$$\mathcal{H}(\{n_m\}) = -\mu \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} n_m + V \sum_{\langle mn \rangle} n_m n_n. \quad (5.11)$$

Тут $n_m = 0, 1$ — число заповнення на вузлі m ($m = 1, \dots, \mathcal{N}$) допоміжної трикутної ґратки. Якщо $n_m = 0$, то на m -ому димерному зв'язку нема локалізованого маґнона, а якщо $n_m = 1$, то локалізований маґнон є. Перша (друга) сума у (5.11) пробігає всі вузли (зв'язки між найближчими сусідами), і $\mu = h_{\text{sat}} - h$, $V = J_1$.

Увівши нові змінні $\sigma_m = 2n_m - 1$, з (5.11) легко отримати модель Ізинга на трикутній ґратці в однорідному магнітному полі:

$$\begin{aligned}\mathcal{H} &= C - \Gamma \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \sigma_m + \mathcal{J} \sum_{\langle mn \rangle} \sigma_m \sigma_n, \\ C &= \mathcal{N} \left(-\frac{\mu}{2} + \frac{3V}{4} \right), \\ \Gamma &= \frac{\mu}{2} - \frac{3V}{2} = \frac{h_{\text{sat}} - h}{2} - \frac{3J_1}{2}, \\ \mathcal{J} &= \frac{V}{4} = \frac{J_1}{4}.\end{aligned}\tag{5.12}$$

Ефективний гамільтоніан (5.12) описує конфігурації двошару, якщо в ґратці є два стани на димерному зв'язку: поляризований стан $(|\uparrow\uparrow\rangle)$ і локалізований магнон $[(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}]$.

5.2.2. Теорія збурень

До ефективного гамільтоніана (5.12) можна прийти й іншим способом. Для більшої загальності вважатимемо навіть, що взаємодія між найближчими сусідами в окремому шарі J_1 і фрустрована взаємодія між шарами J_X є різними, але ця різниця є малою: $|J_1 - J_X|/J_2 \ll 1$. Звичайно, J_2 є найбільша обмінна взаємодія. В режимі сильних полів і низьких температур є два істотні стани на кожному димері: $|u\rangle = |\uparrow\uparrow\rangle$ (поляризований стан) і $|d\rangle = (|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)/\sqrt{2}$ (локалізований магнон). Їхні енергії $\epsilon_u = J_2/4 - h$ і $\epsilon_d = -3J_2/4$ збігаються при $h = h_0 = J_2$. Цей $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений набір основних станів при $h = h_0$ розщеплюється збуренням, яке складається з доданка Зеємана $-(h - h_0) \sum_i s_i^z$ і міждимерних взаємодій із константами зв'язку J_1 і J_X . Ефективний гамільтоніан, який діє в просторі основних станів, можна знайти за допомогою теорії збурень [85, 86]:

$$H_{\text{eff}} = PHP + \dots\tag{5.13}$$

Тут $P = |\varphi_0\rangle \langle \varphi_0|$ — проектор на простір основних станів, $|\varphi_0\rangle = \prod_{m=1}^{\mathcal{N}} |v\rangle_m$, де $|v\rangle$ є або стан $|u\rangle$, або стан $|d\rangle$. Проектор P можна переписати як $P = \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} (|u\rangle \langle u| +$

$|d\rangle\langle d|)_m$. Крім цього, $PHP = PH_0P + PVP$. Після простих розрахунків і введення псевдоспінових операторів $T^z = (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|)/2$, $T^+ = |u\rangle\langle d|$, $T^- = |d\rangle\langle u|$ на кожному вертикальному зв'язку для основної частини одержуємо:

$$\begin{aligned} PH_0P &= P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left[|u\rangle \left(\frac{1}{4}J_2 - h_0 \right) \langle u| + |d\rangle \left(-\frac{3}{4}J_2 \right) \langle d| \right]_{\mathbf{m}} P \\ &= \mathcal{N} \left(-\frac{J_2}{4} - \frac{h_0}{2} \right) - \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} (h_0 - J_2) T_m^z. \end{aligned} \quad (5.14)$$

А для частини, що відповідає збуренню, проведемо такі розрахунки (див.

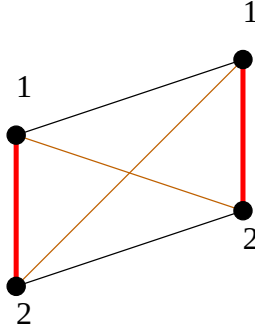


Рис. 5.4. Допоміжна ілюстрація для обчислення PVP .

рис. 5.4):

$$\begin{aligned} PV_{1,1}P &= \frac{J_1}{16} + \frac{J_1}{8}T_{\mathbf{m}}^z + \frac{J_1}{8}T_{\mathbf{m}+1}^z + \frac{J_1}{4}T_{\mathbf{m}}^zT_{\mathbf{m}+1}^z + \frac{J_1}{2}(T_{\mathbf{m}}^xT_{\mathbf{m}+1}^x + T_{\mathbf{m}}^yT_{\mathbf{m}+1}^y); \\ PV_{1,2}P &= \frac{J_X}{16} + \frac{J_X}{8}T_{\mathbf{m}}^z + \frac{J_X}{8}T_{\mathbf{m}+1}^z + \frac{J_X}{4}T_{\mathbf{m}}^zT_{\mathbf{m}+1}^z - \frac{J_X}{2}(T_{\mathbf{m}}^xT_{\mathbf{m}+1}^x + T_{\mathbf{m}}^yT_{\mathbf{m}+1}^y). \end{aligned} \quad (5.15)$$

Об'єднуючи результати (5.14) і (5.15), отримуємо кінцевий вираз для ефективного гамільтоніана:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \mathcal{N} \left[-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3}{8}(J_1 + J_X) \right] - \left[h - J_2 - \frac{3}{2}(J_1 + J_X) \right] \sum_m T_m^z \\ &\quad + \sum_{\langle mn \rangle} \left[\frac{J_1 + J_X}{2} T_m^z T_n^z + (J_1 - J_X)(T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) \right]. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Для ідеальної плоскостонної геометрії ефективний гамільтоніан (5.16) переходить у модель ґраткового газу (5.11) чи у модель Ізинга (5.12). Справді, при

$J_1 = J_X$ маємо:

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N} \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3}{4}J_1 \right) - (h - J_2 - 3J_1) \sum_m T_m^z + \sum_{\langle mn \rangle} J_1 T_m^z T_n^z. \quad (5.17)$$

Замість T_m^z потрібно підставити $-\sigma_m/2$. Справді, $T_m^z = 1/2$ (поляризований триплет на зв'язку m) відповідає $\sigma_m = -1$ чи $n_m = 0$ (поляризований триплет на зв'язку m). Остаточно гамільтоніан (5.16) набуде вигляду:

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N} \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3}{4}J_1 \right) + \frac{1}{2}(h - J_2 - 3J_1) \sum_m \sigma_m + \sum_{\langle mn \rangle} \frac{J_1}{4} \sigma_m \sigma_n. \quad (5.18)$$

Гамільтоніан (5.18) відповідає, з точністю до константи E_{FM} ($\mathcal{H}(\{n_m\}) + E_{FM}$), моделі Ізинга (5.12).

5.3. Жорсткі шестикутники на трикутній ґратці та модель Бекстера

У сильних магнітних полях найнижчі власні стани в підпросторах із великими S^z стають основними станами. Енергія цих найнижчих станів у підпросторах із $S^z = N/2 - n$, де $n = 0, 1, \dots, n_{\text{max}}$, $n_{\text{max}} = N/6$, за наявності магнітного поля h має такі значення:

$$E_n^{\text{lm}}(h) = E_{FM} - h \frac{N}{2} - (\epsilon_1 - h) n, \quad \epsilon_1 = J_2 + 6J_1 = -E_1(\mathbf{k}). \quad (5.19)$$

При полі насичення, коли $h = h_{\text{sat}} = \epsilon_1$, всі ці енергії стають незалежними від n і $E_n^{\text{lm}}(h_{\text{sat}}) = E_{FM} - \epsilon_1 N/2$. Тому система має велику кратність виродження основних станів $\mathcal{W}$ при h_{sat} : $\mathcal{W} = \sum_{n=0}^{N/3} g_{\mathcal{N}}(n)$. Тут $g_{\mathcal{N}}(n)$ позначає кратність виродження основного стану для $2\mathcal{N}$ -вузлової фрустрованої трикутної двошарової ґратки в підпросторі з $S^z = N/2 - n$. Вклад станів незалежних локалізованих магнонів у статистичну суму задається формулою (див. [7, 90, 95]):

$$Z_{\text{lm}}(T, h, N) = \sum_{n=0}^{\frac{N}{3}} g_{\mathcal{N}}(n) \exp \left[-\frac{E_n^{\text{lm}}(h)}{T} \right]. \quad (5.20)$$

Тут $g_{\mathcal{N}}(n) = Z_{\text{hc}}(n, \mathcal{N})$ — це канонічна статистична сума n жорстких шестикутників на $\mathcal{N}$ -вузловій допоміжній трикутній ґратці. Тому співвідношення (5.20) може бути переписане як

$$Z_{\text{lm}}(T, h, N) = \exp\left(-\frac{E_{\text{FM}} - h\frac{N}{2}}{T}\right) \Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}),$$

$$\Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) = \sum_{n=0}^{\frac{\mathcal{N}}{3}} Z_{\text{hc}}(n, \mathcal{N}) \exp\left(\frac{\mu n}{T}\right), \quad \mu = \epsilon_1 - h. \quad (5.21)$$

Тут Ξ_{hc} — велика канонічна статистична сума жорстких шестикутників на $\mathcal{N}$ -вузловій трикутній ґратці з хімічним потенціалом μ . Зазначимо, що h і μ пов'язані таким чином: $\mu = h_{\text{sat}} - h$. Величини визначені для жорстких шестикутників залежать тільки від температури й хімічного потенціалу через активність $z = \exp(\mu/T)$. Це означає, що для фрустрованої квантової системи всі термодинамічні величини залежать від температури й магнітного поля лише через величину $x = (h_{\text{sat}} - h)/T = \ln z$. Тобто, в цьому режимі з'являється універсальна поведінка термодинамічних величин.

Табл. 5.1. Результати точного підрахунку числа конфігурацій жорстких шестикутників на допоміжній трикутній ґратці з $\mathcal{N} = 9$. DGS — виродження основного стану. # HHS — число конфігурацій жорстких шестикутників.

N	S^z	DGS	# HHS
18	8	9	9
	7	9	9
	6	3	3

Провівши точний підрахунок числа конфігурацій жорстких шестикутників на трикутній ґратці, можна записати явні значення для канонічної статистичної суми $g_{\mathcal{N}}(n)$ у випадку скінченної системи з заданим розміром $\mathcal{N}$. Так, для системи з $\mathcal{N} = 9$ отримаємо такий вираз для великої канонічної статистичної суми $\Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})$ (див. табл. 5.1):

$$\Xi_{\text{hc}}(T, \mu, 9) = \sum_{n=0}^3 g_9(n) z^n = 1 + 9z + 9z^2 + 3z^3, \quad z = e^{\frac{\mu}{T}}. \quad (5.22)$$

Для великої канонічної статистичної суми $\Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) = \mathcal{Z}(z, \mathcal{N})$ також відомо результат у термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ (Бекстер [117]). Маючи велику канонічну статистичну суму, легко обчислити всі термодинамічні величини. Наприклад:

$$\begin{aligned}\Omega_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) &= -T \ln \Xi_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}), \\ S_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) &= -\frac{\partial \Omega_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})}{\partial T}, \\ C_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N}) &= T \frac{\partial S_{\text{hc}}(T, \mu, \mathcal{N})}{\partial T}.\end{aligned}\tag{5.23}$$

Найцікавішим наслідком відповідності між фрустрованою квантовою двошаровою ґраткою і ґратковим газом жорстких об'єктів є існування фазового переходу лад-безлад. Загальновідомо, що для моделі ґраткового газу на трикутній ґратці з виключенням перших сусідів, жорсткі шестикутники спонтанно заселяють одну з трьох підґраток трикутної ґратки, коли активність z досягає критичного значення $z_c = 11.09 \dots$ [99]. На мові вихідної фрустрованої квантової спінової моделі, це відповідає впорядкуванню локалізованих магнонів, коли їхня густина зростає. Це відбувається при низьких температурах нижче поля насичення. Оскільки $\ln z_c = (h_{\text{sat}} - h)/T_c$, то для фіксованого (малого) відхилення від поля насичення $h_{\text{sat}} - h$ формула для критичної температури T_c визначається так:

$$T_c = \frac{h_{\text{sat}} - h}{\ln z_c} \approx \frac{h_{\text{sat}} - h}{\ln 11.09} \approx 0.42 (h_{\text{sat}} - h).\tag{5.24}$$

Поведінка такого фазового переходу другого роду належить до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса [116]. Це означає, що теплоємність при T_c (5.24) має степеневу сингулярність $|z - z_c|^{-1/3}$. Звичайно, розрахована T_c (5.24) має бути малою. В іншому випадку розроблена ефективна низькоенергетична теорія перестане працювати.

Нагадаємо, що модель жорстких шестикутників на трикутній ґратці точно розв'язав Бекстер у 1980 році за допомогою кутової матриці переносу [117]. Для $\kappa(z) = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \mathcal{Z}^{1/\mathcal{N}}(z, \mathcal{N})$ та $z = \exp(\mu/T)$, коли $0 < z < z_c = (11 + 5\sqrt{5})/2$

маємо таку залежність, задану параметрично:

$$z(x) = \frac{-xH^5(x)}{G^5(x)},$$

$$\kappa(x) = \frac{H^3(x)Q^2(x^5)}{G^2(x)} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(1-x^{6n-4})(1-x^{6n-3})^2(1-x^{6n-2})}{(1-x^{6n-5})(1-x^{6n-1})(1-x^{6n})^2}. \quad (5.25)$$

Тут всі величини виражаються через додаткову дійсну величину x , яка змінюється в діапазоні $-1 < x < 0$. Логарифм функції κ визначає вільну енергію $\Omega_{\text{hc}}/\mathcal{N}$, яка припадає на один вузол системи в термодинамічній границі. Використані додаткові функції H , G і Q у виразах (5.25) визначаються таким чином:

$$H(x) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1-x^{5n-3})(1-x^{5n-2})},$$

$$G(x) = \prod_{n=1}^{\infty} \frac{1}{(1-x^{5n-4})(1-x^{5n-1})},$$

$$Q(x) = \prod_{n=1}^{\infty} (1-x^n). \quad (5.26)$$

В області $z > z_c$ ($0 < x < 1$) мають місце подібні формули:

$$z(x) = \frac{x^{-1}G^5(x)}{H^5(x)},$$

$$\kappa(x) = \frac{x^{-1/3}G^3(x)Q^2(x^5)}{H^2(x)} \prod_{n=1}^{\infty} \frac{(1-x^{3n-2})(1-x^{3n-1})}{(1-x^{3n})^2}. \quad (5.27)$$

Використовуючи точні вирази (5.25) - (5.27), а також той факт, що $z = \exp[(h_{\text{sat}} - h)/T]$, можна, табулюючи ці вирази, отримати, наприклад, температурну залежність теплоємності $C(T)$ для квантового антиферромагнітного спінового трикутного двошару у магнітному полі.

5.4. Низькотемпературна термодинаміка

На рисунку 5.5 представлено порівняння результатів точної діагоналізації для повної моделі (червона крива) та ефективної (зелена крива) для намагніченості для випадку, коли міждимерні взаємодії антиферромагнітні. На рисунку 5.6

представлено результати точної діагоналізації для повної моделі (червона крива) та ефективної (зелена крива) моделі для намагніченості у випадку, коли міждимерні взаємодії феромагнітні. На рисунку 5.7 представлено порівняння резуль-

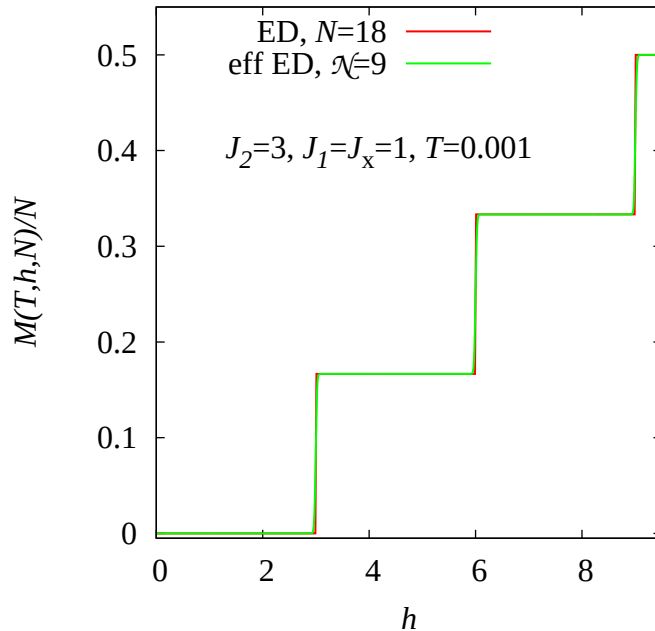


Рис. 5.5. Результати для намагніченості M отримані методом точної діагоналізації для повної моделі з $N = 18$ вузлами (червона крива) та для ефективної моделі з $\mathcal{N} = 9$ вузлами (зелена крива). $J_2 = 3J_1$, $J_1 = J_x = 1$ (антиферомагнітний випадок для міждимерних взаємодій), $T = 0.001$, $h_{\text{sat}} = 9$.

татів точної діагоналізації для повної моделі (червона крива) й ефективної моделі (зелена крива) та результатів із точного підрахунку конфігурацій жорстких шестикутників на допоміжній трикутній ґратці (синя крива) для теплоємності у випадку, коли міждимерні взаємодії антиферомагнітні. На рисунку 5.8 представлено порівняння результатів точної діагоналізації для повної моделі (червона крива) й ефективної моделі (зелена крива) для теплоємності у випадку, коли міждимерні взаємодії феромагнітні. Рисунки 5.9 - 5.12 візуалізують стани, що відповідають різним плато на кривій намагніченості при $T = 0$ (див. рис. 5.5). Плато при $M = 0$ відповідає конфігурації, коли всі димери заповнені магнонами (див. рис. 5.10). Плато при $M = M_{\text{sat}}/3$ відповідає конфігурації, коли два з трьох димерів у трикутнику заповнені локалізованими магнонами (див. рис. 5.12). Плато при

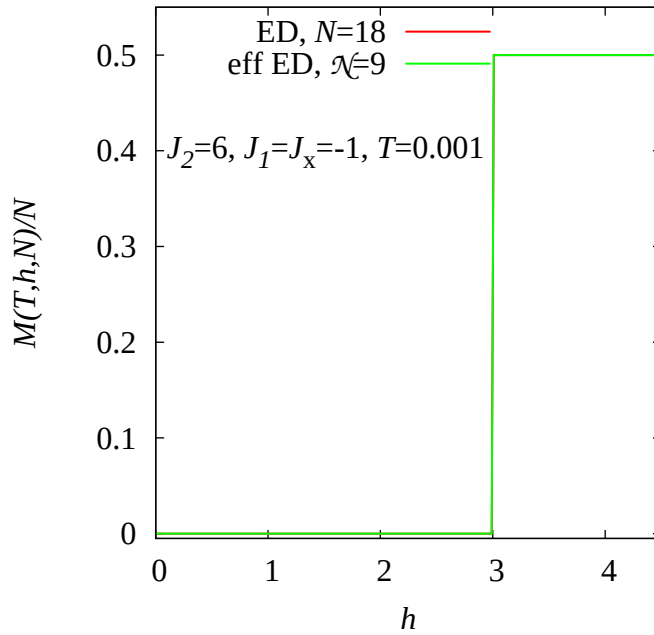


Рис. 5.6. Результати для намагніченості M отримані методом точної діагоналізації для повної моделі з $N = 18$ вузлами (червона крива) та для ефективної моделі з $\mathcal{N} = 9$ вузлами (зелена крива). $J_2 = 6|J_1|$, $J_1 = J_x = -1$ (ферромагнітний випадок для міждимерних взаємодій), $T = 0.001$, $h_{\text{sat}} = 3$.

$M = 2M_{\text{sat}}/3$ відповідає конфігурації, коли один із трьох димерів у трикутнику заповнений локалізованим магноном (при цьому виконується правило жорстких шестикутників) (див. рис. 5.11). Плато при $M = M_{\text{sat}}$ відповідає повністю поляризованому стану (див. рис. 5.9).

Тепер перейдемо до найцікавіших результатів — фазових діаграм для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в площині "магнітне поле-температура", які отримані з ефективної моделі Ізинга на трикутній ґратці (5.12). Фазова діаграма для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в випадку ферромагнітних міждимерних взаємодій $J_1 < 0$ представлена на рисунку 5.13 (а). Діаграма включає в себе лінію фазових переходів першого роду, якими можна керувати за допомогою поля, між синглет-димерною фазою та класичною ферромагнітною фазою, які супроводжуються стрибком намагніченості, що з'являється при критичному полі $h_c/|J_1| = J_2/|J_1| - 3$. Потім досягається фазовий перехід другого роду керований

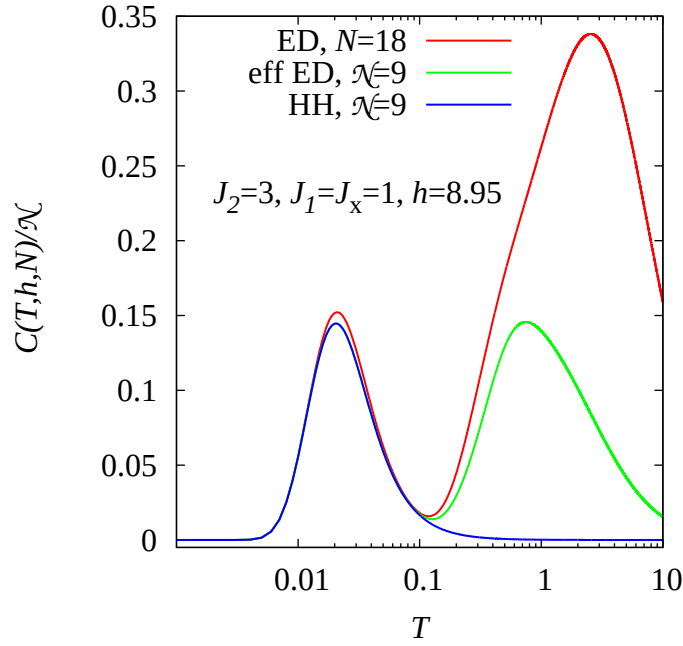


Рис. 5.7. Результати для температурної залежності теплоємності C отримані методом точної діагоналізації для повної моделі з $N = 18$ вузлами (червона крива), для ефективної моделі з $N = 9$ вузлами (зелена крива) та з підрахунку конфігурацій жорстких шестикутників на трикутній ґратці (синя крива). $J_2 = 3J_1$, $J_1 = J_x = 1$ (антиферромагнітний випадок міждиммерних взаємодій), $h = 8.95$.

полем в спеціальній критичній точці, що належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга, з координатами $(h_c/|J_1|; k_B T_c/|J_1|) = (J_2/|J_1| - 3; 1/\ln 3)$.

Фазова діаграма для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в випадку антиферромагнітних міждиммерних взаємодій $J_1 < 0$ є набагато складнішою, тому що крім синглет-димерної та ферромагнітної фаз вона включає в себе ще дві додаткові квантові фази з періодичним (з періодом 3) чергуванням синглетних і поляризованих триплетних станів [див. рис. 5.13 (b)]. Отже, там з'являються, при нульовій температурі, три фазові переходи першого роду, яким відповідають стрибки намагніченості при критичних полях $h_{c1}/J_1 = J_2/J_1$, $h_{c2}/J_1 = J_2/J_1 + 3$ і $h_{c3}/J_1 = J_2/J_1 + 6$, які замінюються чотирма різними, контрольованими полем, фазовими переходами другого роду при скінченних (ненульових) температурах. Фазова діаграма є симетричною по відношенню щодо другого

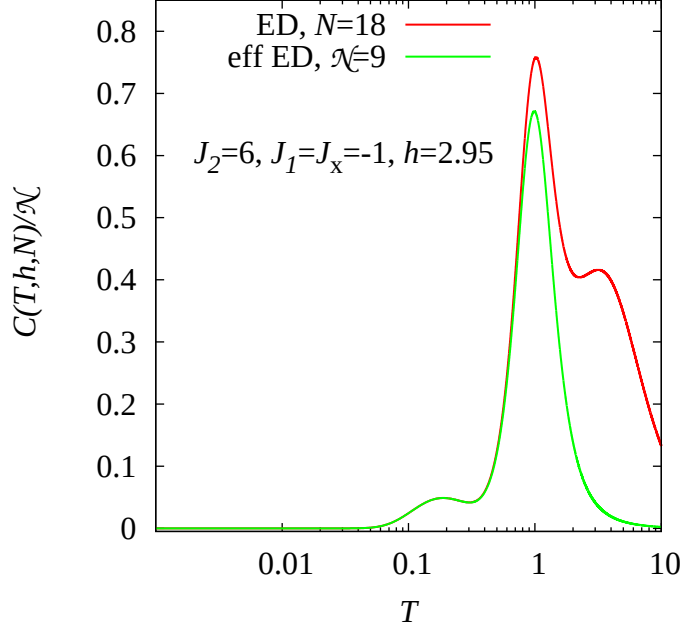


Рис. 5.8. Результати для температурної залежності теплоємності C отримані методом точної діагоналізації для повної моделі з $N = 18$ вузлами (червона крива) та для ефективної моделі з $\mathcal{N} = 9$ вузлами (зелена крива). $J_2 = 6|J_1|$, $J_1 = J_X = -1$ (феромагнітний випадок міждиммерних взаємодій), $h = 2.95$.

критичного поля $h_{c2}/J_1 = J_2/J_1 + 3$, тому що це конкретне значення магнітного поля відповідає нульовому ефективному полю ($h_{\text{eff}} = 0$) для еквівалентного антиферромагнетика Ізинга на трикутній ґратці [див. (5.12) чи (5.17)]. З рисунка 5.13 (b) очевидно, що перше й третє критичні поля при достатньо низьких температурах досягають критичних меж (5.24) із моделі жорстких шестикутників на трикутній ґратці (пунктирні лінії), що свідчить про клас універсальності тристанової моделі Потса для цих двох конкретних фазових переходів, керованих полем. З іншого боку, точна природа фазових переходів, викликаних полем, притаманна для другого й третього критичних полів є набагато складнішою, тому що є аргументи, що вони повинні належати до класу універсальності тристанової моделі Потса при високих температурах і до типу Костерліца-Таулеса при низьких температурах [118–120]. Незважаючи на ці нез'ясовані на сьогодні фазові переходи у антиферромагнітній моделі Ізинга у зовнішньому магнітному полі, два куполи фазових переходів другого роду, керованих полем, розділяють дві періо-

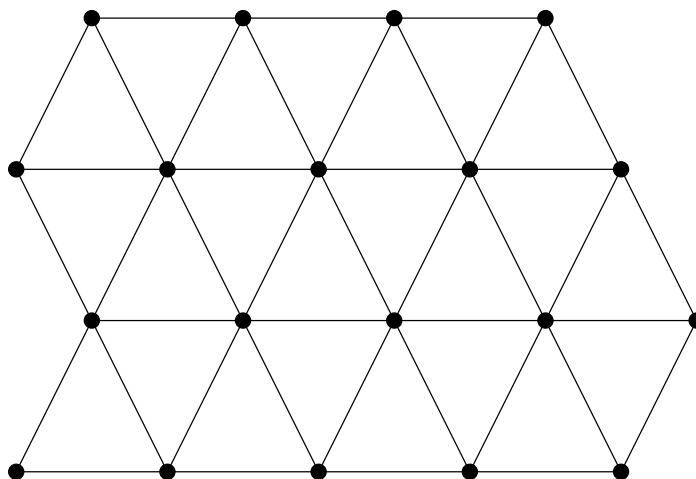


Рис. 5.9. Конфігурація на трикутній двошаровій ґратці (вигляд зверху), що відповідає повністю поляризованому стану (чорні кружки).

дичні квантові фази з регулярним чергуванням "синглет-синглет-триплет" (див. рис. 5.12) чи "синглет-триплет-триплет" (див. рис. 5.11) димерних станів, які проявляються на відповідних кривих намагніченості як проміжні плато одна третя і дві треті від максимальної намагніченості відповідно.

5.5. Висновки

У цьому розділі представлено результати дослідження низькотемпературних термодинамічних властивостей фрустрованого спин-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці за допомогою різних аналітичних і числових методів. Для встановлення відповідності вихідної моделі з класичною моделлю Ізинга на трикутній ґратці було розвинено підхід локалізованих магнонів, де локалізовані багатомагнонні стани визначають низькоенергетичну частину спектру за наявності магнітного поля.

Було продемонстровано, що знак обмінних міждимерних взаємодій J_1, J_X має фундаментальний вплив на властивості фрустрованого квантового антиферромагнетика Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці. Двошарова ґратка з ферромагнітними міждимерними взаємодіями проявляє, при достатньо низьких температурах, фазовий перехід першого роду, керований магнітним полем, який супроводжується різким стрибком намагніченості, поки не буде досягнутий при

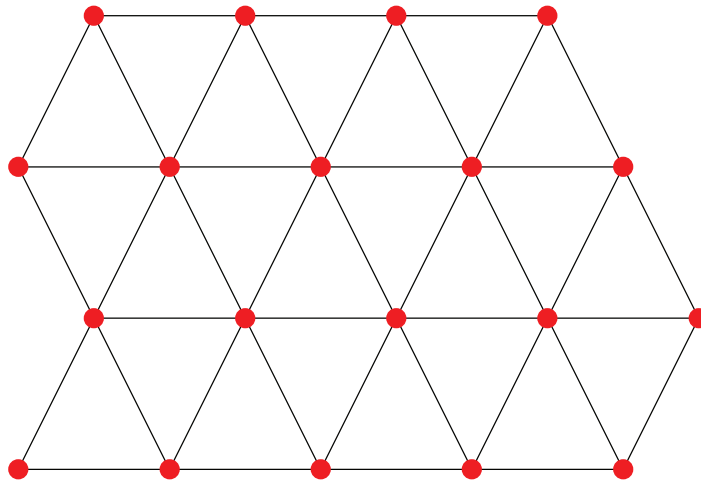


Рис. 5.10. Конфігурація на трикутній двошаровій ґратці (вигляд зверху), що відповідає стану, коли всі вертикальні димери заповнені магнонами (червоні кружки).

критичній температурі фазовий перехід другого роду, керований магнітним полем, із класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. На противагу до цього, двошарова ґратка з антиферромагнітними міждимерними взаємодіями виявляє послідовність із трьох фазових переходів першого роду, керованих магнітним полем, лише при нульовій температурі; ці переходи змінюються на чотири фазові переходи другого роду, керовані магнітним полем, при достатньо малих, але ненульових температурах. Два фазові переходи другого роду, керовані полем, які тісно пов'язані з руйнуванням синглет-димерної фази й початком утворення насиченого ферромагнітного стану належать до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса. В той час як два інші фазові переходи другого роду, керовані магнітним полем, зберігають цю властивість при вищих температурах і є подібними до фазового переходу типу Костерліца-Таулеса при нижчих температурах. Результати цього розділу опубліковано в статті [25].

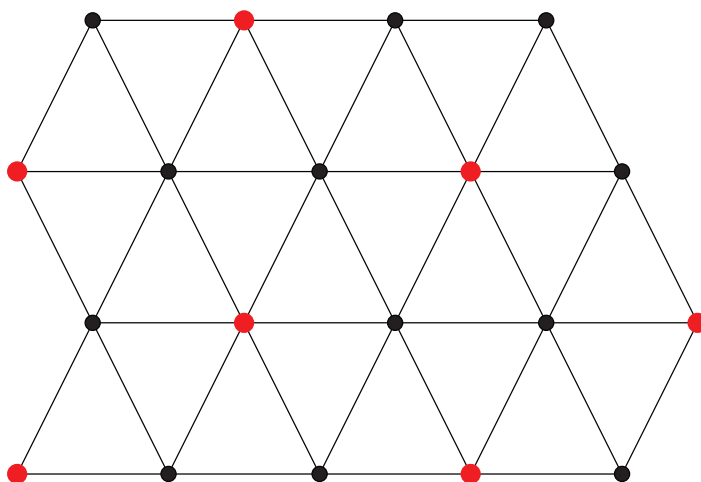


Рис. 5.11. Конфігурація на трикутній двошаровій ґратці (вигляд зверху), що відповідає стану, коли частина вертикальних димерів заповнена магнонами (червоні кружки), і при цьому виконується правило жорстких шестикутників.

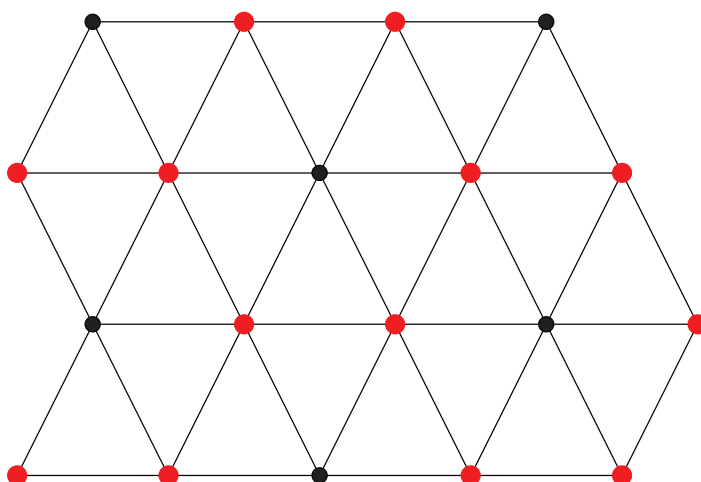


Рис. 5.12. Конфігурація на трикутній двошаровій ґратці (вигляд зверху), що відповідає стану, коли частина вертикальних димерів заповнена магнонами (червоні кружки), й правило жорстких шестикутників порушується.

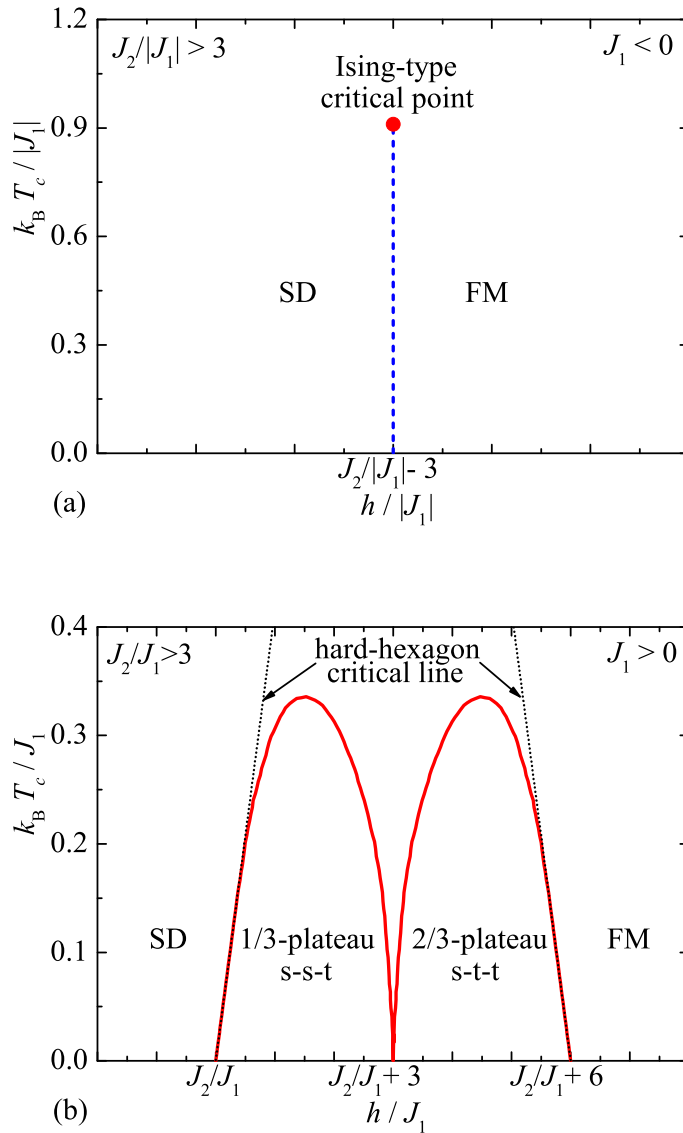


Рис. 5.13. Фазова діаграма для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в площині "магнітне поле – температура яка отримана з ефективної спин-1/2 моделі Ізинга на трикутній ґратці в випадку: (а) ферромагнітних міждимерних взаємодій $J_1 < 0$; (б) антиферромагнітних міждимерних взаємодій $J_1 > 0$. Штрихова лінія в (а) вказує фазові переходи першого роду, які закінчуються в критичній точці фазового переходу другого роду з класу універсальності Ізинга, в той час як суцільні лінії в (б) вказують на фазові переходи другого роду, керовані полем, які досягають при достатньо низьких температурах меж (пунктирні лінії) із моделі жорстких шестикутників на трикутній ґратці, що належить до класу універсальності тристанової моделі Потса. Два куполи відповідають проміжним плато одна третя та дві треті від максимальної намагніченості з регулярним чергуванням синглет-синглет-триплет (див. рис. 5.12) і синглет-триплет-триплет (див. рис. 5.11) димерних станів відповідно.

ВИСНОВКИ

1. Отримано низькотемпературні характеристики одновимірного парамагнетика Тасакі-Габарда в нехтовно малому зовнішньому магнітному полі. Показано, що такий парамагнетик, на відміну від звичайного парамагнетика Кюрі, має залишкову ентропію та швидше намагнічується. Показано, як зникає $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,N}$ із ростом розмірів системи. Результати опубліковано в статті [20].
2. Запропоновано пробні варіаційні хвильові функції для опису станів квантової моделі Гайзенберга на двошарах при $T = 0$ за відсутності магнітного поля. Побудовано фазові діаграми основного стану квантового антиферромагнетика Гайзенберга на квадратному і шестикутному двошарах за відсутності магнітного поля. Показано, що простий підхід добре відтворює недавні результати, отримані значно складнішими методами. Результати опубліковано в препринті [24].
3. На основі концепції локалізованих магнонів розроблено теорію квантового антиферромагнетика Гайзенберга на фрустрованій квадратній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі при низьких температурах для пояснення експериментальних даних, отриманих при вивченні сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у сильних магнітних полях [19]. Передбачено наявність у системі фазового переходу, пов'язаного з впорядкуванням локалізованих магнонів. Ним можна керувати як за допомогою температури, так і за допомогою магнітного поля. Для виявлення фазового переходу на експерименті, запропоновано провести низькотемпературні вимірювання теплоємності для знаходження характерної логарифмічної сингулярності в температурному профілі теплоємності. Результати опубліковано в статті [23].

4. Розроблено систематичну теорію низькотемпературних властивостей спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі для сильних та помірних магнітних полів. Досліджено незвичайні властивості фрустрованої квантової спінової моделі: стрибки намагніченості та широке плато, залишкову ентропію в основному стані при полі насичення, додатковий низькотемпературний пік у температурній залежності теплоємності в околі поля насичення. Виявлено фазовий перехід лад-безлад при скінченній температурі, що належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. У випадку відхилень від ідеальної фрустрації, виявлено стрибки намагніченості, які можна пояснити як спін-флоп переходи в ефективній моделі. Дослідження може стосуватися магнітної сполуки $\text{Vi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Результати опубліковано в статтях [21, 22].
5. Розроблено теорію низькотемпературних термодинамічних властивостей фрустрованого спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці. Виявлено, що феромагнітні міждимерні взаємодії при достатньо низьких температурах приводять до фазового переходу першого роду, який, при зростанні температури, змінюється на фазовий перехід другого роду. Показано, що при нульовій температурі антиферомагнітні міждимерні взаємодії спричиняють послідовність із трьох фазових переходів першого роду. Ці переходи змінюються на чотири фазові переходи другого роду при достатньо малих, але ненульових температурах. Два фазові переходи другого роду, які пов'язані з руйнуванням синглет-димерної фази й початком утворення насиченого феромагнітного стану, належать до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса. Два інші — зберігають цю властивість при вищих температурах, але є подібними до фазового переходу типу Костерліца-Таулеса при нижчих температурах. Результати опубліковано в статті [25].

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Hida K.* Low Temperature Properties of the Double Layer Quantum Heisenberg Antiferromagnet —Modified Spin Wave Method— // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1990. Vol. 59, no. 6. P. 2230–2236.
2. *Wang L., Beach K. S. D., Sandvik A. W.* High-precision finite-size scaling analysis of the quantum-critical point of $S = 1/2$ Heisenberg antiferromagnetic bilayers // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73, no. 1. P. 014431 : 1–10.
3. Quantum paramagnetic ground states on the honeycomb lattice and field-induced Néel order / R. Ganesh, D. N. Sheng, Y.-J. Kim, A. Paramakanti // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83, no. 14. P. 144414 : 1–7.
4. *Ganesh R., Isakov S. V., Paramakanti A.* Néel to dimer transition in spin- S antiferromagnets: Comparing bond operator theory with quantum Monte Carlo simulations for bilayer Heisenberg models // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 84, no. 21. P. 214412 : 1–13.
5. Macroscopic Magnetization Jumps due to Independent Magnons in Frustrated Quantum Spin Lattices / J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, H.-J. Schmidt // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 88, no. 16. P. 167207 : 1–4.
6. *Richter J.* Localized-magnon states in strongly frustrated quantum spin lattices // *Low Temp. Phys.* 2005. Vol. 31, no. 8–9. P. 695–703.
7. Universal properties of highly frustrated quantum magnets in strong magnetic fields / O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, H.-J. Schmidt // *Low Temp. Phys.* 2007. Vol. 33, no. 9. P. 745–756.
8. *Derzhko O., Richter J., Maksymenko M.* Strongly correlated flat-band systems: The route from Heisenberg spins to hubbard electrons // *Int. J. Mod. Phys. B*. 2015. Vol. 29, no. 12. P. 1530007 : 1–72.

9. *Mielke A.* Ferromagnetic ground states for the Hubbard model on line graphs // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1991. Vol. 24, no. 2. P. L73.
10. *Tasaki H.* Ferromagnetism in the Hubbard models with degenerate single-electron ground states // *Phys. Rev. Lett.* 1992. Vol. 69, no. 10. P. 1608–1612.
11. *Mielke A., Tasaki H.* Ferromagnetism in the Hubbard model // *Commun. Math. Phys.* 1993. Vol. 158, no. 2. P. 341–371.
12. Flat band states: Disorder and nonlinearity / D. Leykam, S. Flach, O. Bahat-Treidel, A. S. Desyatnikov // *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 88, no. 22. P. 224203 : 1–6.
13. Detangling flat bands into Fano lattices / S. Flach, D. Leykam, J. D. Bodyfelt, P. Matthies, A. S. Desyatnikov // *Europhys. Lett.* 2014. Vol. 105, no. 3. P. p : 1–6.
14. Compact localized states and flat-band generators in one dimension / W. Maimaiti, A. Andreanov, H. C. Park, O. Gendelman, S Flach // *Phys. Rev. B.* 2017. Vol. 95, no. 11. P. 115135 : 1–8.
15. *Morales-Inostroza L., Vicencio R. A.* Simple method to construct flat-band lattices // *Phys. Rev. A.* 2016. Vol. 94, no. 4. P. 043831 : 1–10.
16. *Richter J., Derzhko O., Krokhmal'skii T.* Finite-temperature order-disorder phase transition in a frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnet in strong magnetic fields // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74, no. 14. P. 144430 : 1–5.
17. *Derzhko O., Krokhmal'skii T., Richter J.* Emergent Ising degrees of freedom in frustrated two-leg ladder and bilayer $s = \frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82, no. 21. P. 214412 : 1–14.
18. *Derzhko O., Krokhmal'skii T., Richter J.* Quantum Heisenberg antiferromagnet on low-dimensional frustrated lattices // *Theor. Math. Phys.* 2011. Vol. 168, no. 3. P. 1236–1245.
19. Almost Perfect Frustration in the Dimer Magnet $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ / H. Tanaka, N. Kurita, M. Okada, E. Kunihiro, Y. Shirata, K. Fujii, H. Uekusa, A. Matsuo, K. Kindo, H. Nojiri // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2014. Vol. 83. P. 103701 : 1–5.

20. Baliha V., Richter J., Derzhko O. One-Dimensional Tasaki-Hubbard Model in Paramagnetic Limit // *Acta Physica Polonica A*. 2017. Vol. 132, no. 4. P. 1256–1260.
21. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field: Unconventional phase transitions in a two-dimensional isotropic Heisenberg model / T. Krokhmal'skii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, J. Richter // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95, no. 9. P. 094419 : 1–11.
22. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field / T. Krokhmal'skii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, J. Richter // *Physica B*. 2018. Vol. 536. P. 388–391.
23. Thermodynamic properties of $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ in a strong magnetic field: Realization of flat-band physics in a highly frustrated quantum magnet / J. Richter, O. Krupnitska, V. Baliha, T. Krokhmal'skii, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97, no. 2. P. 024405 : 1–7.
24. Baliha V., Richter J., Derzhko O. Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnets. Lviv, 2018. 8 p. (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-18-05E).
25. Ising versus Potts criticality in low-temperature magnetothermodynamics of a frustrated spin-1/2 Heisenberg triangular bilayer / J. Strečka, K. Karľová, V. Baliha, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98, no. 17. P. 174426 : 1–14.
26. Baliha V. Парамагнетик Тасакі-Габарда // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 9–10 червня 2016. Львів, 2016. С. 31.
27. Baliha V. Квантовий антиферромагнетик на фрустрованому подвійному шарі з шестикутних ґраток у зовнішньому магнітному полі // XVII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 8–9 червня 2017. Львів, 2017. С. 23.

28. *Baliha V.* Квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на двошарових ґратках. Варіаційний підхід // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 7–8 червня 2018. Львів, 2018. С. 36.
29. *Baliha V.* Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg anti-ferromagnets // IX Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics". Book of Abstracts, Kyiv, December 4–5, 2018. Kyiv, 2018. P. 16.
30. *Lhuillier C., Misguich G.* High Magnetic Fields: Applications in Condensed Matter Physics and Spectroscopy / Ed. by C. Berthier, L. P. Lévy, G. Martinez. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2002. Vol. 595 of *Lecture Notes in Physics*. P. 161–190.
31. *Misguich G., Lhuillier C.* Frustrated Spin Systems / Ed. by H. T. Diep. Singapore, Hackensack : World Scientific, 2013. P. 235–319.
32. *Richter J., Schulenburg J., Honecker A.* Quantum Magnetism / Ed. by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2004. Vol. 645 of *Lecture Notes in Physics*. P. 85–153.
33. Introduction to Frustrated Magnetism. Materials, Experiments, Theory / Ed. by C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila. Springer Series in Solid-State Sciences. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2011.
34. *Gutzwiller M. C.* Effect of Correlation on the Ferromagnetism of Transition Metals // *Phys. Rev. Lett.* 1963. Vol. 10, no. 5. P. 159–162.
35. *Hubbard J.* Electron correlations in narrow energy bands // *Proc. R. Soc. Lond. A*. 1963. Vol. 276, no. 1365. P. 238–257.
36. *Kanamori J.* Electron Correlation and Ferromagnetism of Transition Metals // *Prog. Theor. Phys.* 1963. Vol. 30, no. 3. P. 275–289.
37. *Editorial.* The Hubbard model at half a century // *Nat. Phys.* 2013. Vol. 9. P. 523.
38. *Tasaki H.* The Hubbard model - an introduction and selected rigorous results // *J. Phys.: Condens. Matter*. 1998. Vol. 10, no. 20. P. 4353–4378.
39. *Tasaki H.* From Nagaoka's Ferromagnetism to Flat-Band Ferromagnetism and

- Beyond: An Introduction to Ferromagnetism in the Hubbard Model // *Prog. Theor. Phys.* 1998. Vol. 99, no. 4. P. 489–548.
40. Tasaki H. Hubbard model and the origin of ferromagnetism // *Eur. Phys. J. B.* 2008. Vol. 64, no. 3–4. P. 365–372.
 41. Mielke A. Ferromagnetism in the Hubbard model on line graphs and further considerations // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1991. Vol. 24, no. 14. P. 3311–3321.
 42. Mielke A. Exact ground states for the Hubbard model on the Kagome lattice // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1992. Vol. 25, no. 16. P. 4335–4345.
 43. Mielke A. Critical line of the square-lattice antiferromagnetic Ising model in a magnetic field // *Phys. Lett. A.* 1993. Vol. 174, no. 5–6. P. 443–445.
 44. Derzhko O., Honecker A., Richter J. Low-temperature thermodynamics for a flat-band ferromagnet: Rigorous versus numerical results // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 76, no. 22. P. 220402(R) : 1–4.
 45. Low-temperature properties of the Hubbard model on highly frustrated one-dimensional lattices / O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, M. Maksymenko, R. Moessner // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 81, no. 1. P. 014421 : 1–18.
 46. Flat-Band Ferromagnetism as a Pauli-Correlated Percolation Problem / M. Maksymenko, A. Honecker, R. Moessner, J. Richter, O. Derzhko // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109, no. 9. P. 096404 : 1–5.
 47. High-field ESR measurements of $S = 3/2$ honeycomb lattice antiferromagnet $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ / O. Smirnova, M. Azuma, N. Kumada, Y. Kusano, M. Matsuda, Y. Shimakawa, T. Takei, Y. Yonesaki, N. Kinomura // *J. Am. Chem. Soc.* 2009. Vol. 131, no. 23. P. 8313–8317.
 48. Synthesis, Crystal Structure, and Magnetic Properties of $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ Oxynitrate Comprising $S = 3/2$ Honeycomb Lattice / S. Okubo, F. Elmasry, W. Zhang, M. Fujisawa, T. Sakurai, H. Ohta, M. Azuma, O.A. Sumirnova, N. Kumada // *J. Phys.: Conf. Ser.* 2010. Vol. 200, no. 2. P. 022042 : 1–4.
 49. Disordered Ground State and Magnetic Field-Induced Long-Range Order in an $S = 3/2$ Antiferromagnetic Honeycomb Lattice Compound $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ / M. Matsuda, M. Azuma, M. Tokunaga, Y. Shimakawa, N. Kumada // *Phys.*

- Rev. Lett.* 2010. Vol. 105, no. 18. P. 187201 : 1–4.
50. *Kandpal H., van den Brink J.* Calculation of magnetic exchange couplings in the $S = 3/2$ honeycomb system $(\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12})\text{NO}_3$ from first principles // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83, no. 14. P. 140412(R) : 1–4.
51. Localized magnetic excitations in the fully frustrated dimerized magnet $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ / N. Kurita, D. Yamamoto, T. Kaneshaka, N. Furukawa, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima, H. Tanaka // *arXiv:1809.00519*.
52. Physical realization of a quantum spin liquid based on a complex frustration mechanism / C. Balz, B. Lake, J. Reuther, H. Luetkens, R. Schönmann, T. Herrmannsdörfer, Y. Singh, A. T. M. N. Islam, E. M. Wheeler, J. A. Rodriguez-Rivera, T. Guidi, G. G. Simeoni, C. Baines, H. Ryll // *Nat. Phys.* 2016. Vol. 12. P. 942–949.
53. Crystal growth, structure and magnetic properties of $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ / C. Balz, B. Lake, M. Reehuis, A. T. M. N. Islam, O. Prokhnenko, Y. Singh, P. Pattison, S. Tóth // *J. Phys.: Condens. Matter*. 2017. Vol. 29, no. 22. P. 1–15.
54. Magnetic Hamiltonian and phase diagram of the quantum spin liquid $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ / C. Balz, B. Lake, A. T. M. N. Islam, Y. Singh, J. A. Rodriguez-Rivera, T. Guidi, E. M. Wheeler, G. G. Simeoni, H. Ryll // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95, no. 17. P. 174414 : 1–16.
55. *Balodhi A., Singh Y.* Synthesis and pressure and field-dependent magnetic properties of the kagome-bilayer spin liquid $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ // *Phys. Rev. Mater.* 2017. Vol. 1, no. 2. P. 024407 : 1–6.
56. *Biswas S., Damle K.* Semiclassical theory for liquidlike behavior of the frustrated magnet $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97, no. 11. P. 115102 : 1–15.
57. *Pohle R., Yan H., Shannon N.* How many spin liquids are there in $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$? // *arXiv:1711.03778*.
58. Ultralow-temperature heat transport in the quantum spin liquid candidate $\text{Ca}_{10}\text{Cr}_7\text{O}_{28}$ with a bilayer kagome lattice / J. M. Ni, Q. Y. Liu, Y. J. Yu, E. J. Cheng, Y. Y. Huang, Z. Y. Liu, X. J. Wang, Y. Sui, S. Y. Li // *Phys.*

- Rev. B*. 2018. Vol. 97, no. 10. P. 104413 : 1–6.
59. *Abraham A., Pryce M. H. L.* The theory of paramagnetic resonance in hydrated cobalt salts // *Proc. R. Soc. Lond. A*. 1951. Vol. 206. P. 173–191.
 60. *Lines M. E.* Magnetic Properties of CoCl_2 and NiCl_2 // *Phys. Rev.* 1963. Vol. 131, no. 2. P. 546–555.
 61. *Gómez Albarracín F., Rosales H.* Field-induced multiple order-by-disorder state selection in an antiferromagnetic honeycomb bilayer lattice // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93, no. 14. P. 144413 : 1–11.
 62. Quantum phase diagram of a frustrated antiferromagnet on the bilayer honeycomb lattice / H. Zhang, C.A. Lamas, M. Arlego, W. Brenig // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93, no. 23. P. 235150 : 1–12.
 63. Origin of magnetic frustration in $\text{Bi}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$ / M. Alaei, H. Mosadeq, I.A. Sarsari, F. Shahbazi // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 96, no. 14. P. 140404(R) : 1–5.
 64. *Bishop R. F., Li P. H. Y.* High-order study of the quantum critical behavior of a frustrated spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnet on a stacked honeycomb bilayer // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 96, no. 22. P. 224416 : 1–14.
 65. Nematic quantum phases in the bilayer honeycomb antiferromagnet / H. Zhang, C. A. Lamas, M. Arlego, W. Brenig // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97, no. 23. P. 235123 : 1–7.
 66. *Gómez Albarracín F. A., Rosales H. D., Serra P.* Phase transitions, order by disorder, and finite entropy in the Ising antiferromagnetic bilayer honeycomb lattice // *Phys. Rev. E*. 2018. Vol. 98, no. 1. P. 012139 : 1–11.
 67. Thermal Critical Points and Quantum Critical End Point in the Frustrated Bilayer Heisenberg Antiferromagnet / J. Stapmanns, P. Corboz, F. Mila, A. Honecker, B. Normand, S. Wessel // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 121, no. 12. P. 127201 : 1–6.
 68. *Kawamura H.* Spin-Wave Analysis of the Antiferromagnetic Plane Rotator Model on the Triangular Lattice-Symmetry Breaking in a Magnetic Field // *J. Phys. Soc. Jpn.* 1984. Vol. 53, no. 8. P. 2452–2455.

69. Broken discrete symmetries in a frustrated honeycomb antiferromagnet / H. D. Rosales, D. C. Cabra, C. A. Lamas, P. Pujol, M. E. Zhitomirsky // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87, no. 10. P. 104402 : 1–5.
70. Cabra D. C., Lamas C. A., Rosales H. D. Quantum disordered phase on the frustrated honeycomb lattice // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83, no. 9. P. 094506 : 1–5.
71. Sachdev S., Bhatt R. N. Bond-operator representation of quantum spins: Mean-field theory of frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 41, no. 13. P. 9323–9329.
72. Knetter C., Uhrig G. S. Perturbation theory by flow equations: dimerized and frustrated $s = 1/2$ chain // *Eur. Phys. J. B*. 2000. Vol. 13. P. 209–225.
73. Zhang H., Lamas C. A. Exotic disordered phases in the quantum J_1 - J_2 model on the honeycomb lattice // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87, no. 2. P. 024415 : 1–10.
74. Giamarchi T., Rüegg C., Tchernyshyov O. Bose-Einstein condensation in magnetic insulators // *Nat. Phys.* 2008. Vol. 4. P. 198–204.
75. Evidence of a field-induced Berezinskii-Kosterlitz-Thouless scenario in a two-dimensional spin-dimer system / U. Tutsch, B. Wolf, S. Wessel, L. Postulka, Y. Tsui, H. O. Jeschke, I. Opahle, T. Saha-Dasgupta, R. Valentí, A. Brühl, K. Remović-Langer, T. Kretz, H.-W. Lerner, M. Wagner, M. Lang // *Nat. Commun.* 2014. Vol. 5. P. 5169 : 1–9.
76. Straßel D., Kopietz P., Eggert S. Magnetocaloric effects, quantum critical points, and the Berezinsky-Kosterlitz-Thouless transition in two-dimensional coupled spin-dimer systems // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 91, no. 13. P. 134406 : 1–8.
77. Kalita V. M., Loktev V. M. Theory of quantum phase transitions in dimerized antiferromagnets // *Low Temp. Phys.* 2010. Vol. 36, no. 8–9. P. 665–670.
78. Kalita V. M., Loktev V. M. On the theory of the magnetization of dimerized magnets // *Jetp Lett.* 2010. Vol. 91, no. 4. P. 183–187.
79. Gros C., Wenzel W., Richter J. The Transition from an Ordered Antiferro-

- magnet to a Quantum Disordered Spin Liquid in a Solvable Bilayer Model // *Europhys. Lett.* 1995. Vol. 32, no. 9. P. 747–752.
80. Independent magnon states on magnetic polytopes / J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Richter, J. Schulenburg // *Eur. Phys. J. B.* 2001. Vol. 24, no. 4. P. 475–481.
 81. *Derzhko O., Richter J.* Universal low-temperature behavior of frustrated quantum antiferromagnets in the vicinity of the saturation field // *Eur. Phys. J. B.* 2006. Vol. 52, no. 1. P. 23–36.
 82. Exact eigenstates and macroscopic magnetization jumps in strongly frustrated spin lattices / J. Richter, J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, H.-J. Schmidt // *J. Phys.: Condens. Matter.* 2004. Vol. 16, no. 11. P. S779–S784.
 83. *Richter J., Derzhko O., Schulenburg J.* Magnetic-Field Induced Spin-Peierls Instability in Strongly Frustrated Quantum Spin Lattices // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 93, no. 10. P. 107206 : 1–4.
 84. *Honecker A., Läuchli A.* Frustrated trimer chain model and $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63, no. 17. P. 174407 : 1–9.
 85. *Mila F., Schmidt K. P.* Introduction to Frustrated Magnetism / Ed. by C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 2011. Vol. 164 of *Springer Series in Solid-State Sciences*. P. 537–559.
 86. *Fulde P.* Electron Correlations in Molecules and Solids. Berlin, Heidelberg : Springer-Verlag, 1993. P. 77.
 87. *Richter J., Schulenburg J.* The spin-1/2 J_1 - J_2 Heisenberg antiferromagnet on the square lattice: Exact diagonalization for $N = 40$ spins // *Eur. Phys. J. B.* 2010. Vol. 73, no. 1. P. 117–124.
 88. *Wu X., Wu F.* Critical line of the square-lattice antiferromagnetic Ising model in a magnetic field // *Phys. Lett. A.* 1990. Vol. 144, no. 3. P. 123–126.
 89. *Wang X.-Z., Kim J.* The Critical Line of an Ising Antiferromagnet on Square and Honeycomb Lattices // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 78, no. 3. P. 413–416.
 90. *Zhitomirsky M., Tsunetsugu H.* Exact low-temperature behavior of a kagomé antiferromagnet at high fields // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 70, no. 10.

- P. 100403 : 1–4.
91. *Schmidt H.-J.* Linear energy bounds for Heisenberg spin systems // *J. Phys. A: Math. Gen.* 2002. Vol. 35. P. 6545–6555.
 92. *Holstein T., Primakoff H.* Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet // *Phys. Rev.* 1940. Vol. 58. P. 1098–1113.
 93. *Honecker A., Mila F., Troyer M.* Magnetization plateaux and jumps in a class of frustrated ladders: A simple route to a complex behaviour // *Eur. Phys. J. B.* 2000. Vol. 15, no. 2. P. 227–233.
 94. *Derzhko O., Richter J.* Finite low-temperature entropy of some strongly frustrated quantum spin lattices in the vicinity of the saturation field // *Phys. Rev. B.* 2004. Vol. 70, no. 10. P. 104415 : 1–6.
 95. *Zhitomirsky M., Tsunetsugu H.* High Field Properties of Geometrically Frustrated Magnets // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* 2005. Vol. 160. P. 361–382.
 96. *Baxter R., Enting I., Tsang S.* Hard-square lattice gas // *J. Stat. Phys.* 1980. Vol. 22, no. 4. P. 465–489.
 97. *Baxter R., Tsang S.* Entropy of hard hexagons // *J. Phys. A.* 1980. Vol. 13, no. 3. P. 1023–1030.
 98. *Baxter R. J.* Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. New York : Academic Press, 1982.
 99. *Baxter R.* Planar lattice gases with nearest-neighbor exclusion // *Ann. Comb.* 1999. Vol. 3, no. 2–4. P. 191–203.
 100. *Debierre J.-M., Turban L.* Critical behaviour of the hard-core lattice gas on the honeycomb lattice // *Phys. Lett. A.* 1983. Vol. 97, no. 6. P. 235–238.
 101. *Turban L., Debierre J.-M.* Hard-triangle magnetic exponent through phenomenological renormalization along the coexistence line // *Phys. Lett. A.* 1984. Vol. 103, no. 1–2. P. 81–83.
 102. *Strečka J., Jaščur M.* A brief account of the Ising and Ising-like models: mean-field, effective-field and exact results // *Acta Physica Slovaca.* 2015. Vol. 65, no. 4. P. 235–367.
 103. *Wu F., Wu X., Blöte H.* Critical frontier of the antiferromagnetic Ising model

- in a magnetic field: The honeycomb lattice // *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 62, no. 24. P. 2773–2776.
104. *Wu F., Wu X., Blöte H.* Critical frontier of the antiferromagnetic Ising model in a magnetic field: The honeycomb lattice // *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 63, no. 6. P. 696.
 105. *Wang X.-Z., Kim J.* Critical line of an anisotropic Ising antiferromagnet on square and honeycomb lattices // *Phys. Rev. E*. 1997. Vol. 56, no. 3. P. 2793–2804.
 106. *Kim S.-Y.* Honeycomb-lattice antiferromagnetic Ising model in a magnetic field // *Phys. Lett. A*. 2006. Vol. 358, no. 4. P. 245–250.
 107. *de Queiroz S.* Critical line of honeycomb-lattice anisotropic Ising antiferromagnets in a field // *Phys. Rev. E*. 2013. Vol. 87, no. 2. P. 024102 : 1–4.
 108. Frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets at high magnetic fields: Beyond the flat-band scenario / O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, T. Krokhmalskii // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 88, no. 9. P. 094426 : 1–14.
 109. Frustrated diamond-chain quantum XXZ Heisenberg antiferromagnet in a magnetic field / J. Richter, O. Krupnitska, T. Krokhmalskii, O. Derzhko // *J. Magn. Magn. Mater.* 2015. Vol. 379. P. 39–44.
 110. The ALPS project release 1.3: Open-source software for strongly correlated systems / A.F. Albuquerque, F. Alet, P. Corboz, P. Dayal, A. Feiguin, S. Fuchs, L. Gamper, E. Gull, S. Gürtler, A. Honecker et al. // *J. Magn. Magn. Mater.* 2007. Vol. 310, no. 2. P. 1187–1193.
 111. The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems / B. Bauer, L.D. Carr, H.G. Evertz, A. Feiguin, J. Freire, S. Fuchs, L. Gamper, J. Gukelberger, E. Gull, S. Gürtler et al. // *J. Stat. Mech.* 2011. Vol. P05001. P. 1–34.
 112. *Yunoki S.* Numerical study of the spin-flop transition in anisotropic spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 65, no. 9. P. 092402 : 1–4.
 113. *Holtschneider M., Wessel S., Selke W.* Classical and quantum two-dimensional anisotropic Heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 75,

- no. 22. P. 224417 : 1–6.
114. Successive spin-flop transitions of a Néel-type antiferromagnet Li_2MnO_3 single crystal with a honeycomb lattice / K. Balamurugan, S.-H. Lee, J.-S. Kim, J.-M. Ok, Y.-J. Jo, Y.-M. Song, S.-A. Kim, E.S. Choi, M.D. Le, J.-G. Park // *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 90, no. 10. P. 104412 : 1–7.
 115. Néel L. Propriétés magnétiques de l'état métallique et énergie d'interaction entre atomes magnétiques // *Ann. Phys.* 1936. Vol. 11, no. 5. P. 232–279.
 116. Wu F. The Potts model // *Rev. Mod. Phys.* 1982. Vol. 54, no. 1. P. 235–268.
 117. Baxter R. Hard hexagons: exact solution // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1980. Vol. 13, no. 3. P. L61–L70.
 118. Kinzel W., Schick M. Phenomenological scaling approach to the triangular Ising antiferromagnet // *Phys. Rev. B*. 1981. Vol. 23, no. 7. P. 3435–3441.
 119. Nienhuis B., Hilhorst H. J., Blöte H. W. J. Triangular SOS models and cubic-crystal shapes // *J. Phys. A: Math. Gen.* 1984. Vol. 17, no. 18. P. 3559–3581.
 120. Qian X., Wegewijs M., Blöte H. W. J. Critical frontier of the triangular Ising antiferromagnet in a field // *Phys. Rev. E*. 2004. Vol. 69, no. 3. P. 036127 : 1–13.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

1. *Baliha V., Richter J., Derzhko O.* One-Dimensional Tasaki-Hubbard Model in Paramagnetic Limit // *Acta Physica Polonica A*. 2017. Vol. 132, no. 4. P. 1256–1260.
2. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field: Unconventional phase transitions in a two-dimensional isotropic Heisenberg model / T. Krokhmalskii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, J. Richter // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95, no. 9. P. 094419 : 1–11.
3. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field / T. Krokhmalskii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, J. Richter // *Physica B*. 2018. Vol. 536. P. 388–391.
4. Thermodynamic properties of $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ in a strong magnetic field: Realization of flat-band physics in a highly frustrated quantum magnet / J. Richter, O. Krupnitska, V. Baliha, T. Krokhmalskii, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97, no. 2. P. 024405 : 1–7.
5. *Baliha V., Richter J., Derzhko O.* Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnets. Lviv, 2018. 8 p. (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-18-05E).
6. Ising versus Potts criticality in low-temperature magnetothermodynamics of a frustrated spin-1/2 Heisenberg triangular bilayer / J. Strečka, K. Karlová, V. Baliha, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98, no. 17. P. 174426 :

1–14.

7. *Балига В.* Парамагнетик Тасаки-Габарда // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 9–10 червня 2016. Львів, 2016. С. 31.
8. *Балига В.* Квантовий антиферромагнетик на фрустрованому подвійному шарі з шестикутних ґраток у зовнішньому магнітному полі // XVII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 8–9 червня 2017. Львів, 2017. С. 23.
9. *Балига В.* Квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на двошарових ґратках. Варіаційний підхід // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 7–8 червня 2018. Львів, 2018. С. 36.
10. *Baliha V.* Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg anti-ferromagnets // IX Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics". Book of Abstracts, Kyiv, December 4–5, 2018. Kyiv, 2018. P. 16.

ДОДАТОК Б

АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

1. *Baliha V.* Парамагнетик Тасакі-Габарда // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 9–10 червня 2016. Львів, 2016. С. 31.
2. *Baliha V.* Квантовий антиферромагнетик на фрустрованому подвійному шарі з шестикутних ґраток у зовнішньому магнітному полі // XVII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 8–9 червня 2017. Львів, 2017. С. 23.
3. *Baliha V.* Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field // International Conference on Strongly Correlated Electron Systems. Poster, Prague (Czech Republic), July 17–21, 2017. Prague, 2017.
4. *Baliha V.* Квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на двошарових ґратках. Варіаційний підхід // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини. Збірка тез, Львів, 7–8 червня 2018. Львів, 2018. С. 36.
5. *Baliha V.* Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnets // IX Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics". Book of Abstracts, Kyiv, December 4–5, 2018. Kyiv, 2018. P. 16.