

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

ДЕРЖКО Олег Володимирович

УДК 536.75; 538.9

**Ефекти анізотропії, регулярної неоднорідності і випадкового безладу
у низьковимірних спінових моделях**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
доктора фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2004

Дисертацією є рукопис.

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

- Офіційні опоненти
- доктор фізико-математичних наук, професор **Дідух Леонід Дмитрович**, Тернопільський державний технічний університет імені Івана Пулюя, завідувач кафедру фізики;
 - доктор фізико-математичних наук, професор **Ткач Микола Васильович**, Чернівецький національний університет імені Юрія Федьковича, завідувач кафедру теоретичної фізики;
 - доктор фізико-математичних наук, професор **Швець Валерій Тимофійович**, Одеська державна академія холоду, завідувач кафедру вищої математики.
- Провідна організація
- Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України (м.Київ), відділ нелінійної фізики конденсованого стану.

Захист відбудеться “___” _____ 2004 року о __ год. __ хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д **35.156.01** при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011, м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

З дисертацією можна ознайомитись у науковій бібліотеці Інституту фізики конденсованих систем НАН України за адресою: 79026, м. Львів, вул. Козельницька, 4.

Автореферат розіслано “___” _____ 2004 року.

Вчений секретар

спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,

кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Спінові моделі конденсованих середовищ виникли відразу після появи квантової механіки. Завдяки Діраку і Гайзенбергу (а також Ван Флеку, Слетеру і багатьом іншим) з'явилося поняття обмінної взаємодії. У 1931 році Бете запропонував підстановку для знаходження хвильової функції ланцюжка спінів, у якому взаємодіють лише найближчі сусіди з обмінною взаємодією Гайзенберга (спіновий ланцюжок Гайзенберга). Дещо раніше Ізинг знайшов статистичну суму ланцюжка спінів з простішою міжспіноюю обмінною взаємодією (спіновий ланцюжок Ізинга). Визначальну роль у дальшому розвитку статистичної теорії багаточасинкових систем і теорії фазових переходів відіграла праця Онзагера 1944 року, у якій він обчислив статистичну суму моделі спінів Ізинга на квадратній ґратці (за відсутності зовнішнього магнітного поля). Цей точний розв'язок продемонстрував, як у системі багатьох взаємодіючих частинок виникає фазовий перехід, а також показав, що поведінка різних величин в околі температури фазового переходу може характеризуватися набором показників, що відрізняються від тих, які передбачає теорія середнього поля. У другій половині двадцятого століття ряд важливих результатів теорії конденсованих систем були отримані саме для спінових моделей (це і теорія спінових хвиль, і ряд нових точно розв'язуваних (спінових) моделей систем багатьох взаємодіючих частинок, і ряд строгих результатів для (спінових) моделей систем багатьох взаємодіючих частинок). Ширшим стало і коло фізичних задач, у яких виникали спінові моделі. Окрім традиційної теорії магнетизму, зумовленого локалізованими магнітними моментами, (псевдо)спінові моделі знайшли застосування і в теорії сегнетоелектриків, екситонів, сплавів, в ґраткових теоріях класичних і квантових рідин, в квантовій оптиці тощо.

Незважаючи на те, що дослідження властивостей спінових моделей ведуться вже коло вісімдесяти років, інтерес до них не зникає. Скоріше навпаки: з початку дев'яностих років минулого століття інтерес до спінових моделей значно зріс. У зв'язку з відкриттям високотемпературних надпровідників в кінці вісімдесятих років минулого століття багато зусиль було зосереджено на експериментальному і теоретичному дослідженні купратів, які можуть виявляти високотемпературну надпровідність. Це привело до синтезу споріднених сполук, які описуються двовимірними, драбинковими чи одновимірними спіновими моделями. Так у 1993 році була синтезована перша неогранічна сполука CuGeO_3 , яка виявляє спінову нестійкість Пайєрлса (Hase M., Terasaki I., Uchinokura K. // *Phys. Rev. Lett.* 1993, **70** 3651). Інші сполуки, які з'явилися у зв'язку з дослідженнями у цій області – низьковимірні спінові моделі на екзотичних ґратках (див., наприклад, Miyahara S., Ueda K. // *J. Phys.: Condens. Matter* 2003, **15** R327), які виявляють нетривіальні магнітні властивості (плато чи стрибки у кривих намагнічення при

низьких температурах), фракціоналізацію елементарних збуджень (Coldea R., Tennant D. A., Tylczynski Z. // *Phys. Rev. B* 2003, **68** 134424), часто з анізотропією/антисиметрією обмінної взаємодії чи геометричними фрустраціями. З другого боку, спінові моделі вдається реалізувати у молекулярних магнетиках. Такі молекулярні магнетики, де елементарним носієм магнетизму є молекула чи “організований” з них молекулярний кристал (наприклад, одновимірний), є перспективними матеріалами для пам’яті комп’ютерів. Інше можливе застосування квантових спінових ланцюжків – квантовий комп’ютинг; квантові спінові ланцюжки розглядаються також з точки зору використання у лініях квантового зв’язку (Bose S. // *Phys. Rev. Lett.* 2003, **91** 207901). Ще один приклад спінових моделей можна навести у зв’язку з матерією з охолоджених атомів. Магнітокалоричний ефект і проекти магнітних холодильних установок, вільних від екологічно шкідливих газів, що руйнують озоновий шар, знову ж таки пов’язані з спіновими моделями (Tegus O., Bruck E., Buschow K. H. J., de Boer F. R. // *Nature* 2002, **415** 150; Zhitomirsky M. E., Honecker A. // arXiv:cond-mat/0404683).

Чим привабливі спінові моделі? По-перше, звичайно вони простіші за електронні моделі (Габарда, Фалікова-Кімбала, Андерсона тощо). Часто спінові моделі з’являються у граничних випадках тієї чи іншої моделі сильно корельованих електронів. На прикладі спінових моделей часто можна з’ясувати загальні риси сильно корельованих квантових систем, які притаманні і складнішим моделям, але вивчати які є значно трудніше. Так багато особливостей квантових фазових переходів можна зрозуміти на прикладі одновимірної моделі Ізинга у поперечному магнітному полі (Sachdev S. *Quantum phase transitions*. – Cambridge: Cambridge University Press, 1999). Підкреслимо також, що за останні десять-двадцять років з’явилося багато нових методів дослідження квантових систем з сильними кореляціями (наприклад, бозонізація і інші методи низьковимірних теорій поля, розвиток методу Бете, чисельні методи), які були напочатку застосовані для аналізу саме спінових систем.

Таким чином, дослідження низьковимірних квантових спінових моделей сьогодні становить значний інтерес, про що свідчить і величезний потік публікацій на цю тему у провідних фізичних журналах, і багато конференцій, присвячених обговоренню сучасного стану розвитку науки у цій області.

Зв’язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дослідження у області статистичної механіки спінових моделей мають давні традиції у Львові і починаються, мабуть, з шістдесятих років двадцятого століття. Такі дослідження, зокрема, тісно пов’язані з теперішньою науковою тематикою Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України. Дослідження, результати яких представлені у дисертації, були виконані у відділі теорії модельних

спінових систем Інституту фізики конденсованих систем НАН України у відповідності з планом наукової роботи за темами: #0194U022990 “Розробка мікроскопічної теорії релаксаційних явищ і термодинамічних властивостей неупорядкованих систем в кластерному підході”, #0199U000667 “Дослідження впливу зовнішніх полів і безладу на фазовий перехід і фізичні властивості псевдоспінових систем з суттєвими короткосяжними і далекосяжними взаємодіями” та #0102U000219 “Дослідження регулярних і неупорядкованих сегнетоактивних матеріалів у базисному підході”.

Мета і задачі дослідження. Мета представлених у дисертації досліджень – проаналізувати можливі прояви у макроскопічних властивостях низьковимірних спінових моделей регулярної неоднорідності міжспінових взаємодій чи локальних полів, наявності випадкових взаємодій чи полів, анізотропії взаємодій (у спіновому просторі чи у реальному просторі), а також фрустрації взаємодій. *Об’єктом досліджень* є вплив особливостей мікроскопічних взаємодій у спінових моделях на їх макроскопічну поведінку. Для цього було розглянуто ряд спінових гамільтоніанів (Ізинга, Гайзенберга, XY моделі) на одновимірних і двовимірних ґратках (зокрема, квадратній ґратці і ґратках квадратне кагомі і кагомі). Нас цікавили статичні та динамічні сприйнятливості, структурні фактори, намагніченості, теплоємності та інші термодинамічні величини. Ми вивчали структурну нестійкість спінової ґратки (спінову нестійкість Пайерлса), а також критичну поведінку в околі точок фазових переходів. *Предметом досліджень* були термодинамічні і динамічні властивості низьковимірних спінових моделей з регулярнозмінними, випадковими, конкуруючими взаємодіями. Для досягнення цілей досліджень ми використовували ряд *методів* сучасної теорії конденсованих систем: ферміонізацію Йордана-Вігнера, метод функцій Гріна, метод неперервних дробів, теорію спінових хвиль тощо. Ми також використовували чисельні розрахунки, які у випадку малих систем доповнювали скінченорозмірним скейлінгом.

Наукова новизна одержаних результатів. У дисертаційній роботі запропоновано новий аналітичний метод дослідження термодинамічних властивостей спін-1/2 XY ланцюжків (ізотропного XY ланцюжка у поперечному полі, поперечного ланцюжка Ізинга, анізотропного XY ланцюжка без поля) з регулярнозмінними параметрами гамільтоніана. Метод ґрунтується на ферміонізації Йордана-Вігнера і використанні представлення неперервних дробів для функцій Гріна. Цей підхід дозволяє отримати щільність розподілу енергій чи квадратів енергій елементарних збуджень аналітично, що є перевагою у порівнянні з іншими методами. Підхід узагальнено на складніший випадок, коли параметри гамільтоніана є випадковими величинами (певного типу).

У дисертаційній роботі запропоновано кілька нових точно розв'язуваних моделей спінових ланцюжків з випадковими параметрами гамільтоніана. Запропоновані моделі з скорельованим безладом є поширенням на випадок спінових систем раніше відомих результатів для електронних систем. В результаті аналізу термодинаміки цих моделей було показано, як безлад може проявляти себе у макроскопічних властивостях, зокрема, у процесах намагнічення таких магнітних систем.

У дисертаційній роботі було досліджено структурні нестійкості деяких одновимірних і двовимірних ґраток, зумовлених механізмом Пайерлса, за наявності зовнішнього магнітного поля і/чи антисиметричних міжспінових взаємодій. Розгляд стосувався ізотропної/анізотропної XY моделі і моделі Гайзенберга. Зокрема, вперше передбачено структурну нестійкість моделі Гайзенберга на ґратці каґомі при полі насичення.

Практичне значення одержаних результатів. Результати, представлених у дисертації досліджень, мають (крім самостійного інтересу) застосування до інших проблем теорії конденсованих систем. Так результати проведеного аналізу властивостей спінових систем в основному стані та при ненульових температурах важливі для розуміння динамічних властивостей таких систем (динаміка димеризованих спінів-1/2 ізотропних XY ланцюжків розглядалася у працях de Lima J. P., Goncalves L.L. // arXiv:cond-mat/0111372; Derzhko O., Krokhmalskii T., Stolze J. // *J. Phys. A* 2002, **35** 3573; динаміка ланцюжків з скорельованим безладом розглядалася у працях Derzhko O., Krokhmalskii T. // *physica status solidi (b)* 2000, **217** 927; динаміка zz спінових кореляцій двовимірних систем розглядалася у працях Derzhko O., Krokhmalskii T. // *Physica B* 2003, **337** 357; Nunner T. S., Kopp T. // *Phys. Rev. B* 2004, **69** 104419). Отримані в дисертації результати для регулярнозмінних спінів-1/2 XY ланцюжків є корисними при вивченні складніших ланцюжків, наприклад, ланцюжків Гайзенберга (Cabra D. C., Grynberg M. D., Honecker A., Pujol P. // arXiv:cond-mat/0010376; Tong P., Zhong M. // *Physica B* 2001, **304** 91). Результати, що стосуються впливу взаємодії Дзялошинського-Морія на нестійкість Пайерлса, потрібні для розуміння результатів чисельного дослідження складніших спінових ланцюжків (див., наприклад, Yang Z., Wang Z., Chen H. // *J. Phys.: Condens. Matter* 2002, **14** L19), а також для побудови теорії, що не використовує адіабатичної ґраниці. Результати дальшого дослідження властивостей запропонованої нами точно розв'язуваної моделі можна знайти у праці Goncalves L. L., Vieira A. P. // *J. Magn. Magn. Mater.* 1998, **177-181** 79. Результати застосування двовимірної ферміонізації Йордана-Вігнера для спінів-1/2 систем розвиваються далі у праці Cabra D. C., Rossini G. L. // *Phys. Rev. B* 2004, **69** 184425. Ми сподіваємося, що виконаний нами аналіз структурної нестійкості деяких квантових фрустрованих антиферромагнетиків у сильних зовнішніх магнітних полях, стимулюватиме відповідні експериментальні дослідження.

Особистий внесок здобувача. Усі викладені в дисертації оригінальні результати отримані автором дисертації самостійно або при його безпосередній участі. У спільних публікаціях автору дисертації належить постановка задач, вибір методів дослідження; він брав участь у виконанні аналітичних і чисельних розрахунків та інтерпретації отриманих результатів. Цілий ряд результатів отримані дисертантом самостійно: застосування методу неперервних дробів до розрахунку термодинамічних функцій регулярнозмінних спінів-1/2 XY ланцюжків, узагальнення методу за наявності випадкового (лоренцового) поперечного поля, тестування наближення сильного зв'язку для розрахунку кривої намагніченості, результати для термодинаміки регулярнозмінного спінів-1/2 анізотропного XY ланцюжка без поля, аналіз властивостей в основному стані класичних регулярнозмінних ланцюжків, а також застосування двовимірного перетворення Йордана-Вігнера до розрахунку термодинамічних функцій спінів-1/2 анізотропної XY моделі на квадратній ґратці. Автор також самостійно виконав аналітичні розрахунки при дослідженні спінів-пайєрлсової нестійкості ґраток квадратне кагомі і кагомі у сильних магнітних полях.

Апробація роботи. Основні результати дисертаційної роботи доповідалися та обговорювалися на таких міжнародних наукових конференціях: Small Triangle Meeting on theoretical physics (Medzev, Slovak Republic, 2003), International Conference on Theoretical Trends in Low-Dimensional Magnetism (Florence, Italy, 2003), International Workshop and Seminar on Quantum Phase Transitions (Dresden, Germany, 2003), International Workshop and Seminar on Modern Aspects of Quantum Impurity Systems (Dresden, Germany, 2003), 28th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Saarbrücken, Germany, 2003), 288. WE-Heraeus-Seminar on the Theme of "Quantum Magnetism: Microscopic Techniques for Novel States of Matter" (Bad Honnef, Germany, 2002), 19th General Conference of the EPS Condensed Matter Division held jointly with CMMP 2002 - Condensed Matter and Materials Physics (Brighton, UK, 2002), 11th Czech and Slovak Conference on Magnetism (Kosice, Slovak Republic, 2001), XII School of Modern Physics on Phase Transitions and Critical Phenomena (Ladək Zdroj, Poland, 2001), Ampere Summer School "Applications of Magnetic Resonance in Novel Materials" (Nafplion, Greece, 2000), Aperiodic 2000 (Nijmegen, The Netherlands, 2000), 227. WE-Heraeus-Seminar on Microscopic Theories of Phase Transitions: Quantum Versus Thermal Fluctuations (Bad Honnef, Germany, 1999), Localisation 99. International Conference on Disorder and Interaction in Transport Phenomena (Hamburg, Germany, 1999), The European Conference Physics of Magnetism 99 (Poznan, Poland, 1999), International Workshop on Cooperative Phenomena in Statistical Physics: Theory and Applications (Dresden, Germany, 1999), XXth IUPAP International Conference on Statistical Physics STATPHYS20 (Paris, France, 1998), Summer College in Condensed Matter on "Statistical

Physics of Frustrated Systems” (ICTP, Trieste, Italy, 1997), 22nd Seminar of the Middle European Cooperation in Statistical Physics (Szklarska Poreba, Poland, 1997), 9th International Conference on Rapidly Quenched and Metastable Materials (Bratislava, Slovakia, 1996), 6th European Magnetic Materials and Applications Conference, First International Workshop on Simulation of Magnetization Processes (Vienna, Austria, 1995), Research Workshop on Condensed Matter Physics, Miniworkshop on Quantum Incoherence and Quantum Coherence in Strongly Correlated Systems (ICTP, Trieste, Italy, 1995), 34 Schladming Winter Workshop on Low-Dimensional Models in Statistical Physics and Quantum Field Theory (Schladming, Austria, 1995), International Conference on Magnetism 1994 (Warsaw, Poland, 1994). Результати дисертації також були представлені на ряді всесоюзних, всеукраїнських та регіональних конференцій. Окремі результати були темами семінарів, проведених автором в університетах Магдебурга, Дортмунда, Вроцлава, Будапешта, Львова та неодноразово обговорювалися на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України і відділу теорії модельних спінових систем цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 1 розділ у колективній монографії, 31 журнальну статтю, 1 препринт; з них 7 публікацій є одноосібними, а 26 з кількома співавторами. Перелік основних публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об’єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, семи розділів, висновків та списку використаних джерел. Робота викладена на 263 сторінках (разом з літературою – 298 сторінок), включає бібліографічний список, що містить 329 найменувань.

ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** висвітлено актуальність теми дослідження, сформульовано мету роботи та відзначено її наукову новизну і практичне значення.

У **першому розділі** “Низьковимірні спінові моделі у фізиці конденсованих систем” розглянуто ряд спінових моделей, що використовуються у фізиці конденсованих систем, приведено стислий огляд методів, які застосовуються для аналізу їх властивостей, та отриманих за їх допомогою результатів. Особлива увага зосереджена на методі, що ґрунтується на перетворенні Йордана-Вігнера. Цей метод дозволяє зобразити квантову спін-1/2 модель з допомогою системи безспінових ферміонів Йордана-Вігнера. Далі приведено короткий перелік основних результатів, отриманих у підході ферміонізації Йордана-Вігнера, а також сформульовано проблеми, які розглядатимуться у дисертації.

У **другому розділі** “Статичні сприйнятливості неоднорідного ланцюжка Ізинга” приведено результати аналізу впливу неоднорідності обмінних взаємодій на залежність від температури

компонент тензора початкової (тобто у нульовому зовнішньому магнітному полі) статичної сприйнятливості $\chi_{\beta\alpha} = \frac{\partial}{\partial h_\alpha} \frac{1}{N} \sum_n \langle s_n^\beta \rangle$, $h_\alpha \rightarrow 0$. На відміну від підходу запропонованого Ідогакі, Рікітоку і Такером (Idogaki T., Rikitoku M., Tucker J. W. // *J. Magn. Magn. Mater.* 1996, **152** 311), який ґрунтувався на тотожності Калена-Сузукі, ми скористалися теорією лінійного відгуку і точними результатами для спінових кореляційних функцій неоднорідного ланцюжка Ізинга з гамільтоніаном $H_0 = \sum_n J_n s_n^x s_{n+1}^x$. Остаточна відповідь має вигляд:

$$\chi_{xx} = \frac{1}{4kT} \left(1 + \frac{2}{N} \sum_n \sum_{p>n} \left(-\tanh \frac{J_n}{4kT} \right) \dots \left(-\tanh \frac{J_{p-1}}{4kT} \right) \right), \quad (1)$$

$$\chi_{yy} = \chi_{zz} = \frac{1}{2N} \sum_n \left(\frac{\tanh \frac{J_{n-1}}{4kT} - \tanh \frac{J_n}{4kT}}{J_{n-1} - J_n} + \frac{\tanh \frac{J_{n-1}}{4kT} + \tanh \frac{J_n}{4kT}}{J_{n-1} + J_n} \right), \quad (2)$$

а решта компонент тензора $\chi_{\alpha\beta}$ дорівнюють нулю [11,12]. Формули (1), (2) узагальнюють добре відомі результати для однорідного ланцюжка Ізинга на випадок, коли обмінна взаємодія змінюється вздовж ланцюжка. Вони дозволяють вивчити вплив регулярнозмінних чи випадкових обмінних взаємодій на температурну залежність компонент тензора статичних сприйнятливостей.

Проведений аналіз для поздовжньої статичної сприйнятливості χ_{xx} показує, що якщо обмінні взаємодії феромагнітного чи антиферомагнітного типу змінюються регулярно вздовж ланцюжка, то поведінка χ_{xx} при низьких температурах може бути і такою як у феромагнетика, і такою як у антиферомагнетика залежно від конкретного виду послідовності обмінних взаємодій. Приведені на рис. 1, 2 результати для випадкових взаємодій показують, що якщо випадковий

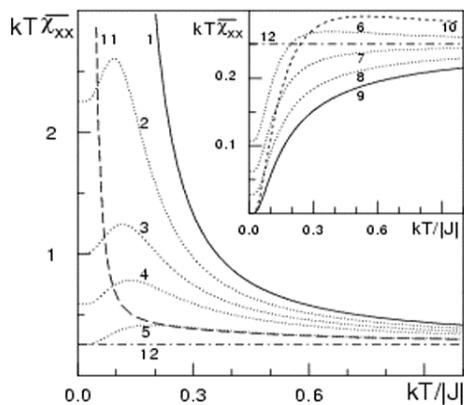


Рис. 1. χ_{xx} для випадкового і регулярнозмінного ланцюжків Ізинга. 1-9: обмінна взаємодія $J_1 = -|J|$ і $J_2 = 0.3|J|$ з'являються випадково з ймовірністю 1, 0.9, ..., 0.1, 0. 10: $J_1 J_2 J_1 J_2 \dots$. 11: $J_1 J_1 J_2 J_2 \dots$.

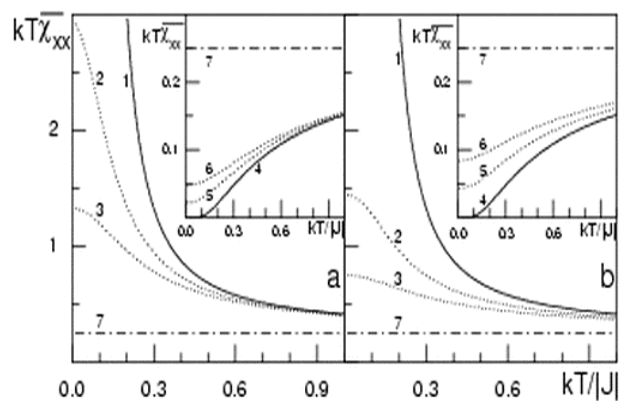


Рис. 2. χ_{xx} для випадкового гаусового (а) і лоренцового (б) безладів у обмінних взаємодіях у ланцюжках Ізинга. 1-3: $J_0 = -|J|$. 4-6: $J_0 = |J|$. 7: $J_0 = 0$.

розподіл містить обмінні взаємодії обох знаків, то феро- чи антиферомагнітна асимптотика χ_{xx} при низькій температурі перетворюється на асимптотику, притаманну парамагнетику. Випадкові обмінні взаємодії можуть сприяти зростанню поперечної статичної сприйнятливості χ_{zz} . У випадку, коли обмінні взаємодії випадково набувають одне з двох значень, χ_{zz} може бути як більше так і менше за сприйнятливість такого ж регулярнозмінного ланцюжка залежно від конкретної послідовності обмінних взаємодій.

У **третьому розділі** досліджуються деякі властивості узагальненої одновимірної спін-1/2 ХУ моделі з гамільтоніаном

$$H = \Omega \sum_n s_n^z + \sum_n \left(J^{xx} s_n^x s_{n+1}^x + J^{xy} s_n^x s_{n+1}^y + J^{yx} s_n^y s_{n+1}^x + J^{yy} s_n^y s_{n+1}^y \right) \quad (3)$$

Перетворенням повороту у спіновому просторі таку модель можна звести до спін-1/2 анізотропного ХУ ланцюжка з z компонентою взаємодії Дзялошинського-Морія (Конторович В. М., Цукерник В. М. // *Журн. експер. теорет. физ.* 1967, **53** 1167). Шляхом перетворень Йордана-Вігнера, Фур'є та Боголюбова спінову модель (3) можна зобразити системою невзаємодіючих ферміонів з енергіями

$$E_\kappa = \frac{J^{xy} - J^{yx}}{2} \sin \kappa + \sqrt{\left(\Omega + \frac{J^{xx} + J^{yy}}{2} \cos \kappa \right)^2 + \left(\left(\frac{J^{xx} - J^{yy}}{2} \right)^2 + \left(\frac{J^{xy} + J^{yx}}{2} \right)^2 \right) \sin^2 \kappa} \quad (4)$$

Це дозволяє розрахувати термодинамічні функції, а також спінові кореляційні функції [3]. У цьому розділі приведено також розрахунок поперечної динамічної сприйнятливості $\chi_{zz}(\omega)$ [3,4]. Детальний аналіз цієї величини виконано для гранично анізотропного випадку (ланцюжок Ізинга в

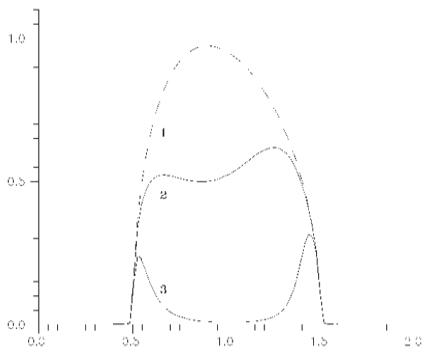


Рис. 3. Залежність уявної частини $\chi_{zz}(\omega)$ від $\frac{\omega}{J}$ для ланцюжка Ізинга у поперечному полі $\frac{\Omega}{J} = 0.25$ при нульовій температурі. 1: $D = 0$, 2: $D = 0.5J$, 3: $D = J$.

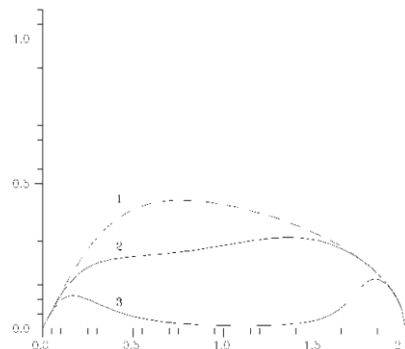


Рис. 4. Те саме, що й на рис. 3 для $\frac{\Omega}{J} = 0.5$.

поперечному полі з взаємодією Дзялошинського-Морія). При цьому показано, що частотний профіль χ_{zz} динамічної сприйнятливості може змінюватися якісно за наявності взаємодії Дзялошинського-Морія D (рис. 3,4).

Вплив взаємодії

Дзялошинського-Морія на динамічні властивості можна дослідити і у іншому граничному випадку – для ізотропного ХУ ланцюжка у поперечному полі [32]. У такій моделі взаємодію Дзялошинського-Морія можна “виключити”, перенормувавши ізотропну ХУ взаємодію. В результаті для zz динаміки можна використати вже відомі результати (Taylor J. H., Muller G. // *Physica A*. 1985, **130** 1). zz динамічні величини зумовлені континуумом двоферміонних (частинка-дірка) збуджень; границі двоферміонного континууму у площині хвильовий вектор – частота та лінії, вздовж яких може мати місце сингулярна поведінка, за наявності взаємодії Дзялошинського-Морія слідує з результатів Тейлора і Мюллера після перенормування величини ізотропної ХУ взаємодії $|J| \rightarrow \sqrt{J^2 + D^2}$. При цьому стає зрозумілим, що взаємодія Дзялошинського-Морія не може бути виявлена у експерименті, пов’язаному з поперечною динамікою. Точні результати для xx (yy) та xy (yx) динамічних величин можуть бути отримані у границі безмежно високої температури, а також при нульовій температурі і сильному (поперечному) магнітному полі. Наприклад, при $\Omega > \sqrt{J^2 + D^2}$ для динамічних структурних факторів маємо:

$$S_{xx}(\omega, \mathbf{k}) \approx iS_{xy}(\omega, \mathbf{k}) \approx \frac{\pi}{2} \delta(\omega - \Omega - \text{sgn}(J)\sqrt{J^2 + D^2} \cos \varphi + \varphi) \quad (5)$$

де $\tan \varphi = \frac{D}{J}$. xx (yy) та xy (yx) динамічні структурні фактори (сприйнятливості) зазнають якісних змін за наявності взаємодії Дзялошинського-Морія (як видно, зокрема, з (5)), а тому динамічні експерименти пов’язані з xx (yy) та xy (yx) динамікою можуть бути використані для експериментального визначення взаємодії Дзялошинського-Морія.

Результати строгого розгляду енергетичного спектру спінової моделі (3) можна використати для аналізу наближення комутаційних співвідношень Бозе (при якому нехтують так званою кінематичною взаємодією), яке часто використовують у теорії квантових спінових систем. Застосувавши таке наближення до спінової моделі (3), приходимо до системи невзаємодіючих бозонів, енергетичний спектр яких збігається з (4), коли має місце симетрія $J^{xx} = J^{yy}$, $J^{xy} = -J^{yx}$ [2,5]. Таким чином, у частинному випадку ізотропного ХУ ланцюжка без чи з взаємодією Дзялошинського-Морія залежність енергії елементарних збуджень від квазіімпульсу не змінюється після наближення комутаційних співвідношень Бозе, тоді ж як у частинному випадку ланцюжка Ізинга у поперечному полі таке наближення приводить до неправильного результату для енергії елементарних збуджень. Різниця, зумовлена кінематичною взаємодією, виникає, починаючи з доданків, пропорційних до квадрату взаємодії.

Третій розділ дисертації завершується аналізом короткочасової спінової динаміки спін-1/2 ХУ ланцюжків, який виконано для простоти у випадку ланцюжка Ізинга у поперечному полі [1].

Якщо розвинути залежний від часу оператор у означенні парної різночасової спінової кореляційної функції у ряд за степенями часу, то коефіцієнти у такому ряді (які пов'язані з однаковочасовими кореляційними функціями) для спін-1/2 XY ланцюжків можуть бути обчислені точно. Приведені у дисертації результати для часовозалежних xx кореляційних функцій одновимірної моделі Ізинга у поперечному полі можуть бути використані для тестування різних наближених результатів (с-циклічне наближення, покращене с-циклічне наближення, наближення Ватараї-Матцубари тощо), а також для конструювання нових наближених виразів для динамічних величин. Зокрема, у дисертації розглянуто таке наближення, що використовує апроксимації Паде короткочасових розвинень.

У **четвертому розділі** "Ізотропні XY ланцюжки з регулярнозмінними параметрами" досліджуються властивості одновимірної спін-1/2 ізотропної XY моделі у поперечному полі з

регулярнозмінними параметрами (міжвузловими взаємодіями і (поперечними) полями на вузлах). Гамільтоніан моделі має вигляд

$$H = \sum_n \Omega_n s_n^z + 2 \sum_n I_n (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y), \quad (6)$$

а послідовність параметрів у (6) є

$\Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \dots \Omega_p I_p \Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \dots \Omega_p I_p \dots$, де p – період регулярної зміни параметрів гамільтоніана. Нас цікавлять властивості системи в основному стані і термодинамічні властивості системи.

Для аналітичного обчислення потрібних для такого дослідження величин ми використовуємо пертворення Йордана-Вігнера, після якого приходимо до одновимірної системи безспінових ферміонів з гамільтоніаном

$$H = \sum_n \Omega_n \left(c_n^+ c_n - \frac{1}{2} \right) + \sum_n I_n (c_n^+ c_{n+1} - c_n c_{n+1}^+). \quad \text{Далі ми}$$

використовуємо представлення з допомогою неперервних

дробів для температурних двочасових функцій Гріна $G_{nm}^\mp(\tau)$

$$(G_{nm}^\mp(t) = \mp i \theta(\pm t) \langle \mathcal{C}_n^\mp(t), c_m^+(0) \rangle). \quad \text{Для регулярнозмінних}$$

ланцюжків неперервні дробу у цьому представленні стають періодичним і можуть бути обчислені точно після ров'язування квадратного рівняння. В результаті отримуємо точний

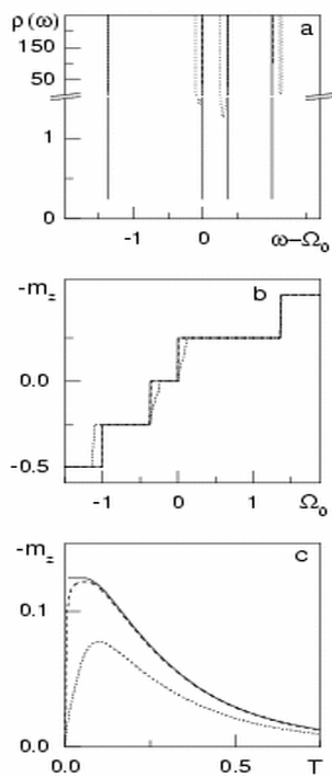


Рис. 5. До існування ненульової середньої поперечної намагніченості при нульовому середньому поперечному полі у ланцюжку з періодом $\Omega \ 0.5 \ \Omega - 1 \ 0.5 \ \Omega \ \Omega + 1 \ I$.
 $I = 0$ (суцільні криві), $I = 0.05$ (штрихові криві), $I = 0.25$ (пунктирні криві).

розв'язок для діагональних функцій Гріна G_{mn}^{\mp} і пов'язаної з ними щільності розподілу енергії елементарних збуджень

$$\rho(\omega) = \mp \frac{1}{\pi N} \sum_{n=1}^N \text{Im} G_{mn}^{\mp} . \quad (7)$$

Щільність станів (7) дозволяє отримати термодинамічні функції спінової моделі (6) [14,15], а також такі локальні величини як (поперечна) намагніченість чи (поперечна) сприйнятливість окремого вузла. Підхід, що використовує неперервні дроби, можна узагальнити на випадок, коли поперечні поля на вузлах є незалежними випадковими змінними з лоренцовою щільністю розподілу ймовірності [14,15].

Регулярнозмінні параметри гамільтоніана приводять до ряду цікавих ефектів у макроскопічних властивостях спінової системи [18,20]. Залежність намагніченості від поля при нульовій температурі містить горизонтальні фрагменти – плато намагніченості. Їх число залежить від періоду неоднорідності, а значення намагніченості є універсальною величиною у відповідності з умовою квантування Ошікави, Яманаки і Аффлека (Oshikawa M., Yamanaka M., Affleck I. // *Phys. Rev. Lett.* 1997, **78** 1984). Значення полів, які відповідають початку/кінцю плато на кривій намагніченість – поле є неуніверсальними величинами, які залежать від конкретних значень параметрів гамільтоніана. Неуніверсальними є і значення локальних намагніченостей, що відповідають плато. Регулярна зміна параметрів гамільтоніана (6) може приводити до появи ненульової намагніченості в нульовому (середньому) полі, а також до немонотонної температурної залежності намагніченості (див. рис. 5). Усереднена щільність станів для моделі з випадковим (лоренцовим) поперечним полем дозволила аналітично дослідити процеси намагнічення у випадковому регулярнозмінному ланцюжку. При цьому було проаналізовано сценарій розмиття плато у кривій намагніченість – поле при появі у системі регулярнозмінного безладу (наприклад, кожне друге поле випадкове). Строгий аналіз процесів намагнічення у регулярнозмінних спин-1/2 ізотропних XY ланцюжках був також використаний для аналізу меж застосовності наближеного підходу до отримання кривих намагніченість – поле (наближення сильного зв'язку) [22,20].

Аналітичні результати для енергії основного стану (вільної енергії Гельмгольца), знайдені з допомогою неперервних дроби дозволяють дослідити спінову нестійкість Пайерлса спин-1/2 ізотропного XY ланцюжка у адіабатичній границі. За відсутності зовнішнього поля однорідний спин-1/2 ізотропний XY ланцюжок структурно нестійкий і структурно димеризується через механізм Пайерлса (Pincus P. // *Solid State Commun.* 1971, **9** 1971). Вплив однорідного поперечного поля на димеризацію Пайерлса обговорювався у праці Taylor J. H., Muller G. // *Physica A.* 1985, **130**

1. Вплив однорідної взаємодії Дзялошинського-Морія за відсутності поля на димеризацію Пайерлса проаналізовано у праці Звягин А. А. // *Журн. експер. теорет. физ.* 1990, **98** 1396. Нові висновки про вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на спін-пайерлсову димеризацію можна отримати при аналізі регулярнозмінного ланцюжка з гамільтоніаном

$$H = \sum_n \Omega_n s_n^z + \sum_n J_n (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + \sum_n D_n (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x), \quad (8)$$

у якому припускатимемо, що $J_{1,2} = J (\pm \delta)$, $D_{1,2} = J (\pm k\delta)$; тут δ є димеризаційний параметр, а параметр k описує можливість різної залежності від міжвузлової відстані ізотропної обмінної взаємодії і взаємодії Дзялошинського-Морія [17,19]. Обчисливши повну енергію ланцюжка, яка складається з магнітної енергії e_0 і пружної енергії $\alpha\delta^2$, ми досліджуємо мінімум/мінімуми у залежності цієї величини від димеризаційного параметра. Типові результати приведено на рис. 6, 7, 8. Такий аналіз дозволяє збудувати фазову діаграму у площині пружність ґратки α – поперечне

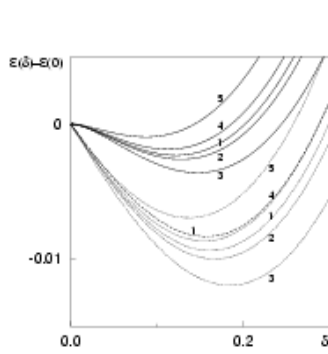


Рис. 6. Залежність зміни повної енергії від димеризаційного параметра для ізотропного XY ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія. $J = 2$, $\Omega = 0$, $\alpha = 0.8$, 1: $D = 0$, 2: $D = 0.4$, $k = 1$, 3: $D = 0.8$, $k = 1$, 4: $D = 0.4$, $k = 0$, 5: $D = 0.8$, $k = 0$.

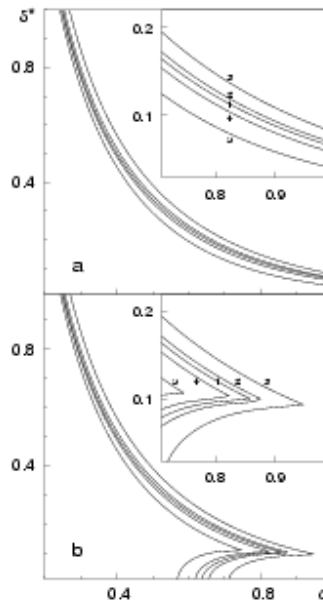


Рис. 7. Залежність димеризаційного параметра від пружності ґратки для ізотропного XY ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія. $J = 2$, $\alpha = 0.8$, $\Omega = 0$ (а), $\Omega = 0.2$ (б), 1: $D = 0$, 2: $D = 0.4$, $k = 1$, 3: $D = 0.8$, $k = 1$, 4: $D = 0.4$, $k = 0$, 5: $D = 0.8$, $k = 0$.

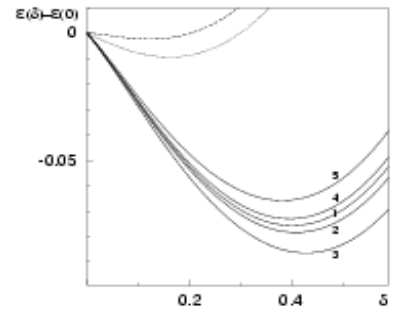


Рис. 8. Залежність зміни повної енергії від димеризаційного параметра для ланцюжка Гайзенберга з взаємодією Дзялошинського-Морія. $J = 2$, $\Omega = 0$, $\alpha = 0.8$, 1: $D = 0$, 2: $D = 0.4$, $k = 1$, 3: $D = 0.8$, $k = 1$, 4: $D = 0.4$, $k = 0$, 5: $D = 0.8$, $k = 0$. Штрихові і пунктирні криві відповідають результатам для ізотропного XY ланцюжка з $N \rightarrow \infty$ і $N = 24$, відповідно.

поле Ω , вказуючи області димеризованої чи однорідної фази температури було показано, що димеризацію за сценарієм роду, наявність однорідної Морія ($k = 0$ у (8)) протидіє димеризації, зменшуючи значення димеризаційного параметра і критичного поля, яке руйнує димеризований стан, тоді ж як при $k > 0$ взаємодія Дзялошинського-

стійкості/метастабільності (рис. 9). Так при нульовій поперечне поле руйнує фазового переходу першого взаємодії Дзялошинського-

Морія може сприяти димеризації Пайерлса (рис. 9). Ми розглянули вплив z компоненти взаємодії Дзялошинського-Морія з параметром $0 \leq k \leq 1$ на спін-пайерлсову димеризацію в основному стані і у складнішому ланцюжку – ізотропному ланцюжку Гайзенберга [19]. Виключаючи z компоненту взаємодії Дзялошинського-Морія з гамільтоніана через відповідне унітарне перетворення, можна побачити, що перенормування компонент взаємодії Гайзенберга, яке має місце при такому

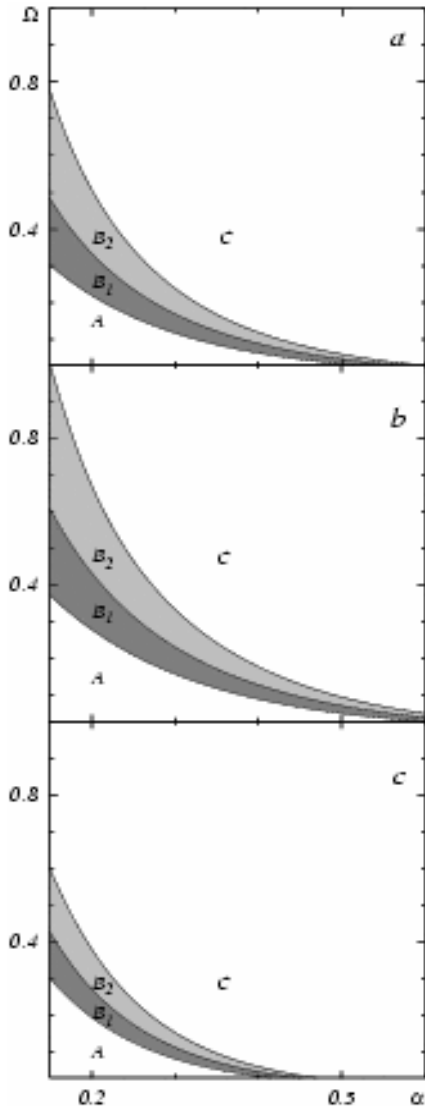


Рис. 9. Фазова діаграма ізотропного XY ланцюжка ($J = 1$), що вказує області стійкості димеризованої (однорідної) фази А (С). У області B_1 (B_2) обидві фази можливі, але димеризована (однорідна) фаза енергетично вигідніша. а: $D = 0$, б: $D = 0.5$, $k = 1$, с: $D = 0.5$, $k = 0$.

перетворенні, “уподібнює” ланцюжок Гайзенберга до ізотропного XY ланцюжка. Ми перевірили також справедливість висновків про вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на спін-пайерлсову димеризацію ланцюжка Гайзенберга в залежності від значення параметра k , виконавши чисельні розрахунки для систем з 24 і 28 спінів (рис. 8).

У **п'ятому розділі** “Регулярнозмінний ланцюжок Ізинга в поперечному полі” досліджується одновимірна модель Ізинга в поперечному полі з гамільтоніаном

$$H = \sum_n \Omega_n s_n^z + \sum_n 2I_n s_n^x s_{n+1}^x \quad (9)$$

У (9) обмінні взаємодії і поля змінюються вздовж ланцюжка регулярно з періодом p , тобто послідовність параметрів є $\Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \dots \Omega_p I_p \Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \dots \Omega_p I_p \dots$. Така модель унітарно еквівалентна ряду інших спінових ланцюжків, термодинаміка яких через це буде однаковою. Зокрема, спін-1/2 анізотропний XY ланцюжок без поля з гамільтоніаном

$$H = \sum_n \left(I_n^x s_n^x s_{n+1}^x + 2I_n^y s_n^y s_{n+1}^y \right) \quad (10)$$

унітарно еквівалентний двом вдвічі коротшим ланцюжкам Ізинга у поперечному полі (9) з параметрами $I_n^x I_{n+2}^x I_{n+4}^x \dots$ (взаємодії), $I_{n+1}^y I_{n+3}^y I_{n+5}^y \dots$ (поля) і $I_{n+1}^x I_{n+3}^x I_{n+5}^x \dots$ (взаємодії), $I_n^y I_{n+2}^y I_{n+4}^y \dots$ (поля) [26,29].

У п'ятому розділі дисертації показано як отримати аналітично термодинамічні функції спінового ланцюжка (9) для довільного скінченного періоду регулярної зміни p ,

використавши перетворення Йордана-Вігнера і неперервні дроби [21]. Для цієї моделі вдається знайти щільність розподілу квадратів енергій елементарних збуджень (безспінових ферміонів Йордана-Вігнера) $R(\mathbb{E}^2)$, через яку виражається вільна енергія Гельмгольца, а отже всі термодинамічні величини. Щільність станів $R(\mathbb{E}^2)$ дозволяє також отримати величину щілини в енергетичному спектрі спінового ланцюжка.

Обговоримо вплив регулярнозмінного поперечного поля (тобто у (9) $\Omega_n = \Omega + \Delta\Omega_n$, $\sum_n \Delta\Omega_n = 0$, $I_n = I$) на властивості спінової моделі (9) [21,26,27,28,29,33]. Аналіз поведінки щілини в енергетичному спектрі із зміною поперечного поля показує, що для ланцюжка з $p = 2$ ($p = 3$) щілина може зникати при двох, трьох або чотирьох (двох, трьох, чотирьох, п'яти або шести) значеннях поля Ω^* . Зникнення щілини в енергетичному спектрі свідчить про точку квантового фазового переходу (у однорідній моделі (9) маємо $\Omega^* = \pm|I|$ – дві точки квантового фазового переходу, критична поведінка в околі яких належить до класу універсальності моделі Ізинга на квадратній ґратці). Досліджуючи критичну поведінку енергетичної щілини і енергії основного стану, ми виявили, що вона може характеризуватися або залежністю $\sim |\Omega - \Omega^*|$ і $\sim (\Omega - \Omega^*)^2 \ln|\Omega - \Omega^*|$, або залежністю $\sim (\Omega - \Omega^*)^2$ і $\sim (\Omega - \Omega^*)^3 \ln|\Omega - \Omega^*|$. В результаті у першому випадку маємо критичну поведінку з класу універсальності моделі Ізинга на квадратній ґратці (з

критичними показниками $z\nu = 1$, $\alpha = 0$ (логарифмічна розбіжність)), а у другому випадку – слабшу сингулярність (квантовий фазовий перехід четвертого роду за класифікацією Еренфеста з критичними показниками $z\nu = 2$, $\alpha = -2$). Ці особливості критичної поведінки були підтверджені результатами чисельного аналізу спінових кореляційних функцій.

Виявлена залежність енергетичної щілини від поперечного поля у

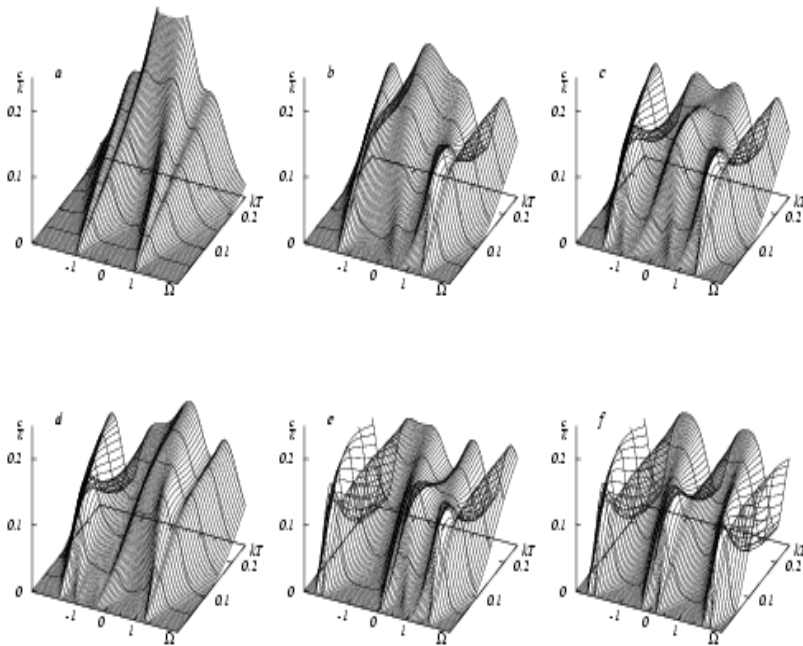


Рис. 10. Можлива низькотемпературна поведінка теплоємності для кількох регулярнозмінних ланцюжків Ізинга у поперечному полі з періодом 3.

регулярнозмінному поперечному ланцюжку Ізинга дозволяє пояснити особливості поведінки поперечної намагніченості, поперечної статичної сприйнятливості чи низькотемпературної теплоємності із зміною поля (див. рис. 10). Зокрема, χ_{zz} при критичних полях може або логарифмічно розбігатися, або мати логарифмічно розбіжну другу похідну за полем, а теплоємність при критичних полях прямує до нуля лінійно із зменшенням температури (див. рис. 10).

Спінові кореляційні функції в загальному випадку не можуть бути знайдені розвинутим

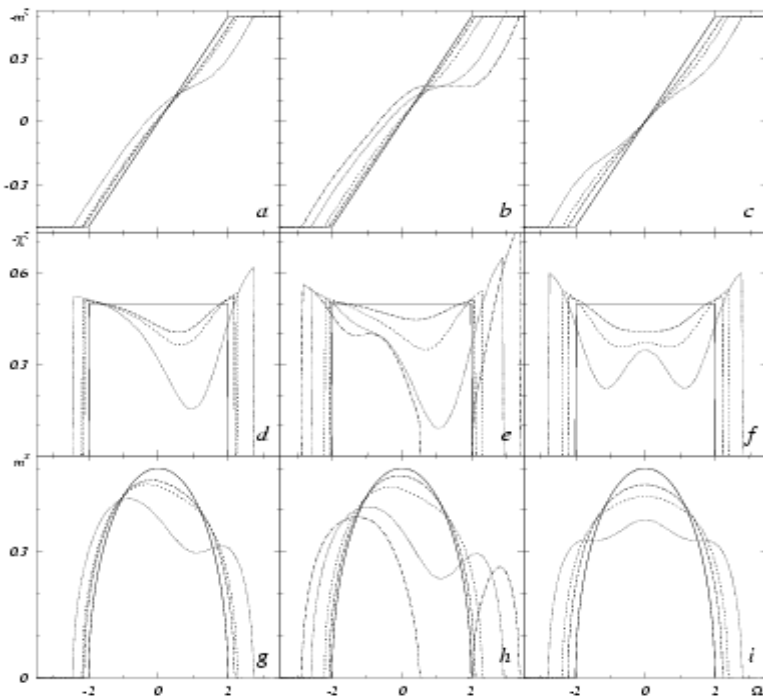


Рис. 11. Намагніченості в основному стані (a,b,c,g,h,i) і статичні поперечні сприйнятливості в основному стані (d,e,f) класичних ланцюжків Ізинга в поперечному полі з регулярнозмінними параметрами з періодом 3.

методом (який дозволяє знайти лише щільність станів $R(\mathbb{C}^2)$ і термодинамічні величини); ці величини можуть бути знайдені чисельним способом. Однак, при деяких значеннях поля (коли поле на одному з вузлів дорівнює нулю) основний стан (а отже і спінові кореляційні функції) моделі (9) вдається визначити точно. При цих значеннях поля після відповідного унітарного перетворення ланцюжок (9) перетворюється у систему незв'язаних кластерів з p вузлів, а тому його властивості в основному стані можуть бути

проаналізовані строго. При цьому отримано, наприклад, значення різних парних спінових кореляційних функцій $\langle s_n^\alpha s_{n+m}^\beta \rangle$.

У п'ятому розділі приведено також аналіз магнітих властивостей при нульовій температурі класичного аналога регулярнозмінних поперечних ланцюжків Ізинга (ізотропних XY ланцюжків), у яких спінові змінні зображаються трикомпонентними векторами (а не матрицями Паулі). Так класичний аналог гамільтоніана (9) має вигляд

$$H = \sum_n \Omega_n s \cos \theta_n + \sum_n 2I_n s^2 \sin \theta_n \sin \theta_{n+1} \cos \varphi_n \cos \varphi_{n+1} . \quad (11)$$

Вибираючи відповідну підстановку для енергії основного стану моделі (11) з параметрами, які визначаються в результаті мінімізації енергії основного стану, можна знайти спінові конфігурації,

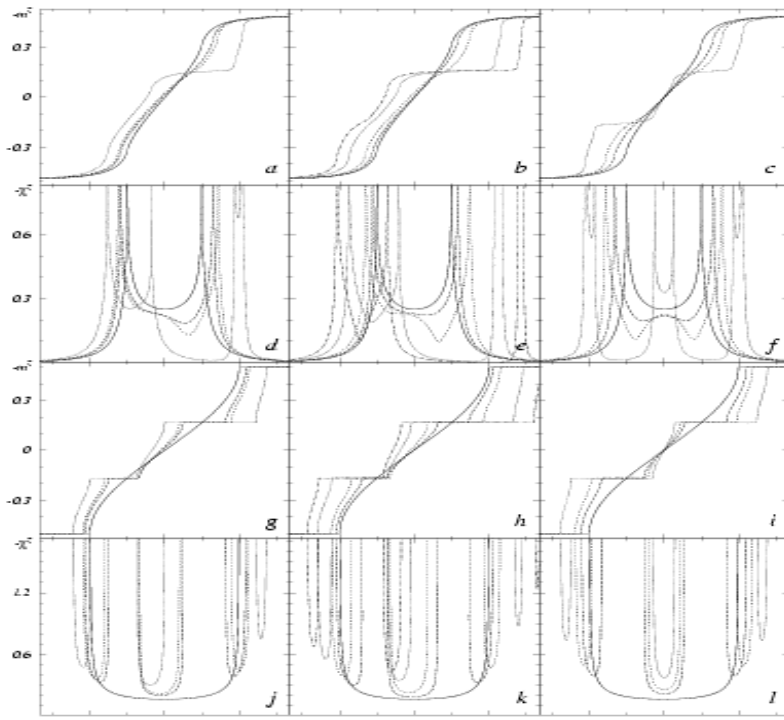


Рис. 12. Поперечні намагніченості в основному стані (a,b,c,g,h,i) і статичні поперечні сприйнятливості в основному стані (d,e,f,j,k,l) поперечних ланцюжків Ізинга (a,b,c,d,e,f) і ізотропних XY ланцюжків у поперечному полі (g,h,i,j,k,l) з регулярнозмінними параметрами з періодом 3.

які реалізуються при тих чи інших значеннях поля Ω . Важливо відзначити, що і у класичному регулярнозмінному ланцюжку можливі плато у залежності намагніченість – поле (див. рис. 11, 12).

Завершується п'ятий розділ аналізом впливу анізотропії обмінної XY взаємодії на структурну димеризацію Пайрлса в основному стані. Використовуючи щільність станів $R \in \mathbb{R}^2$ для спінового ланцюжка (10) з параметрами

$$I_1^x = I(1 + \delta)(1 + \gamma),$$

$$I_1^y = I(1 + \delta)(1 - \gamma),$$

$$I_2^x = I(1 - \delta)(1 + \gamma),$$

$$I_2^y = I(1 - \delta)(1 - \gamma),$$

де γ – параметр анізотропії, ми дослідили поведінку повної енергії як функції димеризаційного параметра і проаналізували, як із зростанням анізотропії димеризований стан перестає бути вигіднішим у порівнянні з однорідним (див. рис. 13). Анізотропія обмінної взаємодії γ подібно до

поперечного поля Ω руйнує димеризовану фазу згідно з

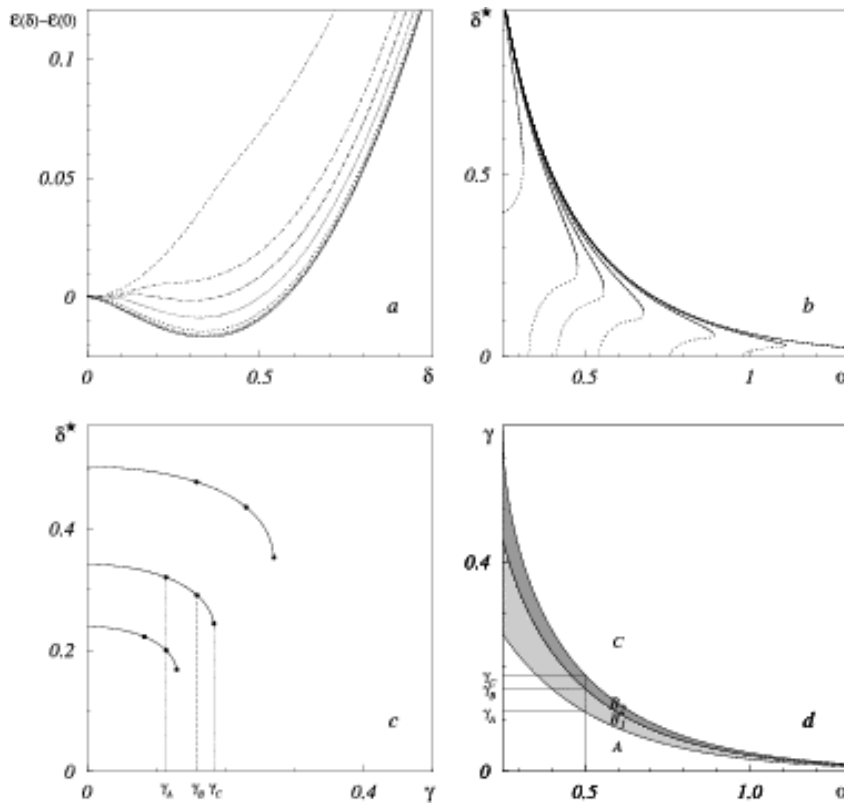


Рис. 13. Зміна повної енергії в основному стані як функція димеризаційного параметра моделі (10) ($I = 1$, $\alpha = 0.25$, $\gamma = 0, 0.025, 0.05, 0.1, 0.15, 0.2, 0.4$ (знизу догори)) (а). Димеризаційний параметр при тих же значеннях γ (б). Димеризаційний параметр як функція γ при $\alpha = 0.2$, $\alpha = 0.4$, $\alpha = 0.8$ (згори донизу) (с). Фазова діаграма (А – димеризована фаза, В – метастабільні фази, С – однорідна фаза) (d).

сценарієм фазового переходу першого роду. Однак, значення димеризаційного параметра δ^* , при якому повна енергія має глобальний мінімум, зменшується (залишається незмінним) із зростанням γ (Ω).

У шостому розділі “Ізотропні ХУ ланцюжки з діагональним і скорельованим безладом” досліджуються термодинамічні властивості ізотропних ХУ ланцюжків з взаємодією Дзялошинського-Морія у випадковому (лоренцовому) поперечному полі (діагональний безлад) або з випадковими (лоренцовими) взаємодіями і полями на вузлах, що залежать лінійно від взаємодій, що оточують вузол (скорельований безлад). Гамільтоніан таких моделей можна записати у вигляді

$$H = \sum_n \Omega_n s_n^z + \sum_n J_n (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + \sum_n D_n (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x). \quad (12)$$

При цьому, наприклад, ізотропні обмінні взаємодії J_n є незалежні випадкові змінні з щільністю розподілу ймовірності Лоренца

$$P(J_n) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma}{J_n - J_0 + \Gamma^2}, \quad (13)$$

взаємодії Дзялошинського-Морія не змінюються від вузла до вузла $D_n = D$, а поперечні поля на вузлах визначаються формулою:

$$\Omega_n - \Omega_0 = \frac{a}{2} (J_{n-1} + J_n - 2J_0), \quad (14)$$

де a є дійсний параметр і $|a| \geq 1$. Після перетворення Йордана-Вігнера випадковий спіновий ланцюжок зображається ланцюжком сильнозв'язаних безспінових ферміонів з комплексним інтегралом переносу; випадкове поле відповідає випадковій енергії на вузлі; випадкова взаємодія відповідає випадковому інтегралу переносу. Для розрахунку усередненої щільності станів ферміонів Йордана-Вігнера, яка дозволяє отримати всі термодинамічні функції спінової моделі, ми використовуємо метод, розвинутий раніше для електронних систем (John W., Schreiber J. // *physica status solidi (b)* 1974, **66** 193). У цьому підході ми усереднюємо за безладом рівняння руху для ферміонних двочасових температурних функцій Гріна, використовуючи контурні інтеграли і критерій Гершгоріна, який дозволяє з'ясувати розташування сингулярностей функцій Гріна у площині комплексних випадкових змінних. Для моделі (12) – (14), наприклад, остаточний результат для усередненої щільності станів має вигляд [6,8,13]:

$$\rho(E) = \frac{1}{\pi} \sqrt{\frac{\sqrt{A^2 + B^2} - A}{2(A^2 + B^2)}},$$

$$A = \epsilon - \Omega_0 + \sqrt{(|a|^2 \Gamma^2 - J_0^2 - D^2)},$$

$$B = 2\Gamma \sqrt{|\epsilon - \Omega_0|} + \text{sgn}(a) J_0. \quad (15)$$

Формула (15) містить у граничному випадку $\Gamma \rightarrow 0$, $|a|\Gamma = \text{const}$ модель з діагональним безладом, яка була досліджена раніше окремо [7,9,10]. Мабуть найцікавішою властивістю моделі з скорельованим безладом є асиметрія щільності станів, яка особливо яскраво проявляється, коли $|a| \approx 1$ (див. рис. 14, 15). Вона має ряд важливих наслідків для термодинаміки. Наприклад, модель з скорельованим безладом може мати ненульову середню намагніченість у нульовому середньому полі при низьких температурах. Ця властивість спостерігалась також і для іншого типу (не обов'язково лоренцового) скорельованого безладу (Goncalves L. L., Vieira A. P. // *J. Magn. Magn. Mater.* 1998, **177-181** 79). Вона справді зумовлена скорельованістю введеного безладу. Розгляньмо певну випадкову реалізацію ланцюжка (12) – (14). Можна очікувати, що у такому ланцюжку буде однакове число вузлів, оточених сильними взаємодіями, і вузлів, оточених слабкими взаємодіями. Через накладене співвідношення (14) для $\Omega_0 = 0$

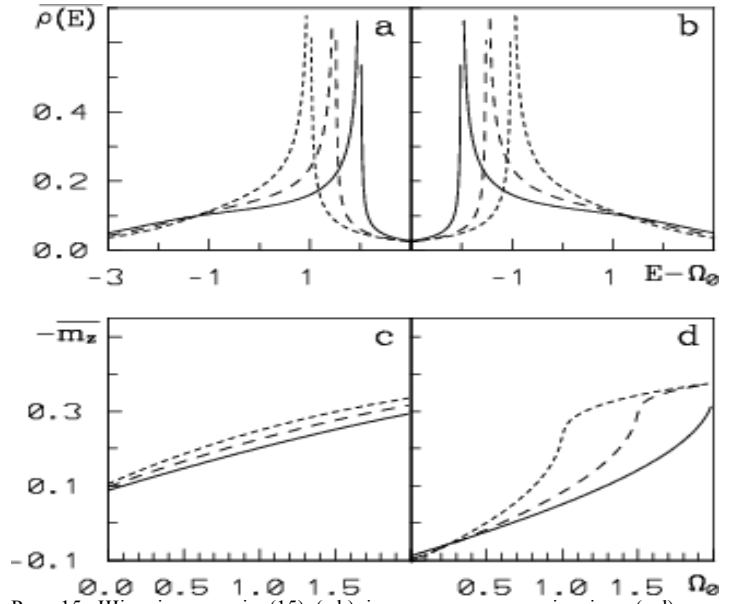


Рис. 15. Щільність станів (15) (a,b) і поперечна намагніченість (c,d) при низькій температурі при $D = 0$, $\Gamma = 1$, $a = -1.01$ (a,c), $a = 1.01$ (b,d). Короткі штрихи відповідають результатам для $J_0 = 1$, довгі штрихи – $J_0 = 1.5$, а суцільні – $J_0 = 2$.

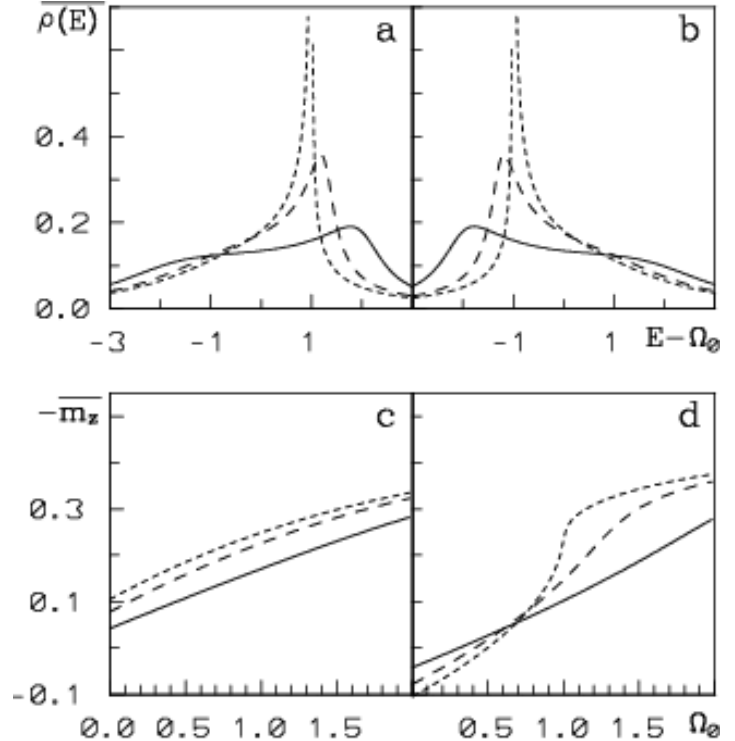


Рис. 14. Щільність станів (15) (a,b) і поперечна намагніченість (c,d) при низькій температурі $J_0 = 1$, $\Gamma = 1$, $a = -1.01$ (a,c), $a = 1.01$ (b,d). Короткі штрихи відповідають результатам для $D = 0$, довгі штрихи – $D = 1$, а суцільні – $D = 2$.

поперечні поля на одних і других вузлах мають однакові значення, але протилежні напрямки, так що середнє поле дорівнює нулю. З другого боку можна очікувати, що вузли, оточені сильними взаємодіями, матимуть меншу намагніченість, а вузли, оточені слабкими взаємодіями, матимуть більшу намагніченість, орієнтовану у протилежному напрямку. В результаті середня намагніченість виявиться відмінною від нуля. Із ростом параметра $|a|$ різниця між протилежно напрямленими намагніченостями меншає. Включення додаткової взаємодії Дзялошинського-Морія між вузлами також робить цю різницю меншою. Ці аргументи пояснюють виникнення ненульової намагніченості у нульовому полі, що зумовлено скорельованістю недіагонального і діагонального безладу. Їх можна доповнити кількісним аналізом асиметрії усередненої щільності

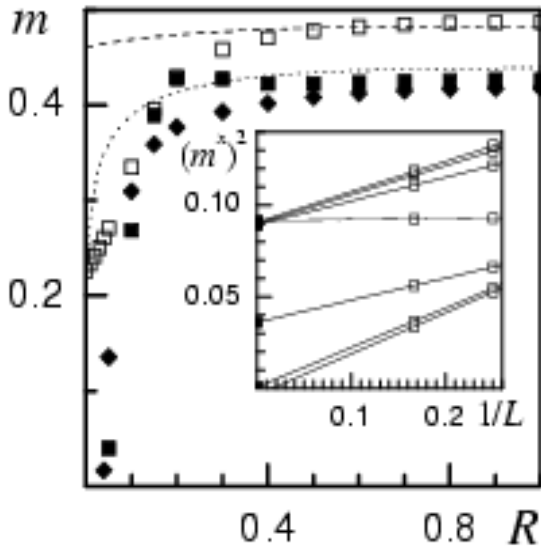


Рис. 16. Параметр порядку для моделі (16) з $\gamma = 0$ із зміною

$$R = \frac{J_{\perp}}{J}. \text{ Результати точної діагоналізації для } N = 36$$

(незаповнені квадратики) доповнені скінченорозмірним скейлінгом (заповнені квадратики). Приведено також результат теорії спінових хвиль (пунктир) і ферміонізаційного підходу (довгий штрих).

станів [16]. А саме, для неоднорідного спін-1/2 ізотропного XY ланцюжка у поперечному полі ми обчислюємо строго моменти щільності станів (перший, другий і третій). Такі результати дозволяють знайти моменти усередненої щільності станів довільного випадкового ланцюжка. Ми проаналізували, за яких умов з'являється відмінний від нуля третій момент усередненої щільності станів при нульовому полі, що сигналізує про асиметрію усередненої щільності станів [16].

У **сьомому розділі** досліджуються двовимірні квантові спінові моделі. Напочатку ми розглядаємо спін-1/2 анізотропну XY модель на просторово анізотропній квадратній ґратці з гамільтоніаном

$$H = \sum_i \sum_j \left[\left(\left(+\gamma \vec{s}_{i,j}^x s_{i+1,j}^x + \left(-\gamma \vec{s}_{i,j}^y s_{i+1,j}^y \right) \right) + J_{\perp} \left(\left(+\gamma \vec{s}_{i,j}^x s_{i,j+1}^x + \left(-\gamma \vec{s}_{i,j}^y s_{i,j+1}^y \right) \right) \right) \right) \right] \quad (16)$$

(тут J і J_{\perp} є обмінні взаємодії між сусідніми спінами вздовж рядка чи стовпця, а параметр γ контролює анізотропію обмінної взаємодії [23,24,25,30]. Така модель дозволяє дослідити вплив просторової анізотропії і анізотропії у спіновому просторі на властивості двовимірної квантової спінової системи. Для аналізу статистико-механічних властивостей моделі (16) ми використали підхід, що ґрунтується на двовимірній ферміонізації Йордана-Вігнера (Fradkin E. // *Phys. Rev. Lett.* 1989, **63** 322) [23,24,25], лінійну теорію спінових хвиль [30], а також виконали скінченорозмірний скейлінг результатів точної діагоналізації для малих систем (з числом спінів меншим за чи рівним

36) [30]. Дослідження енергії основного стану як функції анізотропії у методі двовимірної ферміонізації Йордана-Вігнера передбачає квантовий фазовий перехід першого роду керований анізотропією. Такий аналіз не може бути виконаний у межах лінійної теорії спінових хвиль, але дуже добре узгоджується з висновками, отриманими у методі взаємодіючих кластерів і методі скорельованих базисних функцій (Farnel D. J. J., Kruger S. E., Parkinson J. B. // *J. Phys.: Condens. Matter* 1997, **9** 7601; Farnel D. J. J., Ristig M. L. *cond-mat/0105386*). Ми також дослідили появу намагніченості в основному стані для ізотропної XY моделі, коли у системі невзаємодіючих ланцюжків зростає міжланцюжкова взаємодія (див. рис. 16). Результати отримані різними методами дещо відрізняються, що свідчить про те що ця проблема потребує подальшого аналізу, але у будь-якому разі виникнення параметра порядку з появою міжланцюжкової взаємодії у ізотропній XY моделі відбувається при значно менших значеннях R аніж у відповідній ізотропній моделі Гайзенберга. Ми порівняли результати підходу двовимірної ферміонізації Йордана-Вігнера для термодинамічних величин (теплоємності і параметра порядку) з відомими в окремих випадках точними результатами чи результатами обчислень методом квантового Монте Карло.

У останньому параграфі сьомого розділу ми розглядаємо дві фрустровані антиферромагнітні

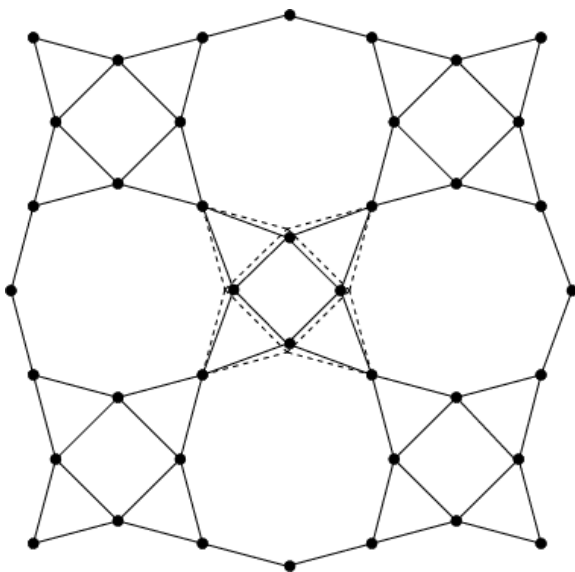


Рис. 17. Гратка квадратне кагомі з одним деформованим квадратом. Частина гратки перед деформацією показана штриховими лініями. Всі зв'язки перед деформацією мали однакову довжину.

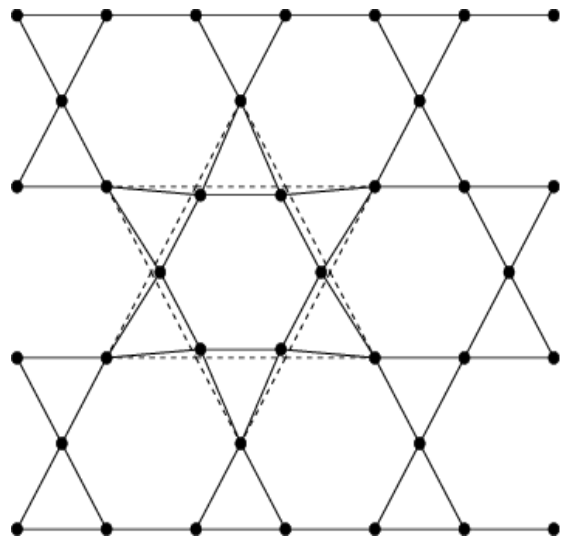


Рис. 18. Гратка кагомі з одним деформованим шестикутником. Частина гратки перед деформацією показана штриховими лініями. Всі зв'язки перед деформацією мали однакову довжину.

спінові гратки Гайзенберга: кагомі і квадратне кагомі [31]. Ці гратки належать до класу фрустрованих квантових антиферромагнетиків, для яких локалізовані магнони можуть бути основними станами у сильному зовнішньому полі, що приводить до стрибка намагніченості при полі насичення у кривій намагніченість – поле при нульовій температурі (Schulenburg J., Honecker A., Schnack J., Richter J., Schmidt H.-J. // *Phys. Rev. Lett.* 2002, **88** 167207). Ми досліджуємо

структурну стійкість таких ґраток відносно певних деформацій через механізм Пайерлса (рис. 17, 18). Спочатку ми обчислюємо зміну магнітної енергії для певних ґраткових зміщень, що відповідають структурі ґратки з локалізованими магнонами, і показуємо, що це зменшення магнітної енергії є пропорційним до величини зміщень, що веде до спін-пайерлсової нестійкості. Оскільки локалізовані магнонні стани стають істотними лише за наявності сильного магнітного поля, така нестійкість є зумовлена магнітним полем і відбувається при полі насичення. При цьому мають місце гістерезисні явища, зокрема, для поля насичення маємо

$$\frac{h_1}{J} = 3 + \frac{3(2 + \sqrt{3})}{32(6 - \sqrt{3})} \frac{J}{\alpha} \quad (18)$$

(ґратка квадратне кагомі) і

$$\frac{h_1}{J} = 3 + \frac{1}{16} \frac{J}{\alpha} \quad (19)$$

(ґратка кагомі); J – величина обмінної антиферромагнітної взаємодії Гайзенберга, α – константа, що характеризує пружність ґратки. При менших полях дві розглянуті ґратки поведуться по-різному. Результати точної діагоналізації для систем з числом спінів до 54 показують, що деформована ґратка квадратне кагомі залишається стійкою, а для ґратки кагомі дисторсія зникає.

Основні результати та висновки.

1. Обчисливши тензор статичної сприйнятливості неоднорідного ланцюжка Ізинга, ми продемонстрували, як регулярна неоднорідність чи випадковий безлад впливають на температурну залежність цієї величини. Як завгодно мало випадкових взаємодій чи порядок/безлад у їх появі можуть якісно змінити характер температурної залежності статичної сприйнятливості при низьких температурах. Запропонована схема обрахунку застосовна до аналізу динамічного структурного фактора неоднорідного ланцюжка Ізинга.

2. Обчисливши zz динамічну сприйнятливість анізотропного XY ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія і xx та xy динамічні сприйнятливості для ізотропного XY ланцюжка при $T=0$ у сильному (поперечному) магнітному полі, ми показали, як взаємодія Дзялошинського-Морія виявляє себе у динамічних властивостях таких систем. Виявлені особливості можуть бути використані для визначення величини цієї взаємодії у динамічних експериментах.

3. На прикладі одновимірної спін-1/2 узагальненої XY моделі досліджено зміну спектру елементарних збуджень в результаті застосування наближення комутаційних співвідношень Бозе для спінових операторів: це наближення його не змінює, якщо обмінна взаємодія ізотропна. Побудовано короткочасові розвинення для залежних від часу парних спінових кореляційних

функцій, які дозволяють 1) тестувати наближені результати; 2) отримувати нові наближення (зокрема, з використанням апроксимант Паде).

4. Запропоновано метод обчислення термодинамічних функцій регулярнозмінного ізотропного ХУ ланцюжка у поперечному полі, який ґрунтується на ферміонізації Йордана-Вігнера і використанні неперервних дробів. Метод застосовний і у випадку випадкового (лоренцового) поперечного поля.

5. Досліджено процеси намагнічення у регулярнозмінних ізотропних ХУ ланцюжках у поперечному полі при низьких температурах. Такі системи можуть мати ненульову намагніченість у нульовому (в середньому) полі, намагніченість може немонотонно залежати від температури, залежність намагніченість – поле може мати горизонтальні ділянки (плато), а значення намагніченості (локальних намагніченостей) є універсальними (неуніверсальними) величинами.

6. Спін-1/2 ізотропний ХУ ланцюжок виявляє нестійкість Пайєрлса щодо димеризації, на яку істотно впливають зовнішнє поле чи/ї додаткова міжспінова взаємодія Дзялошинського-Морія. Взаємодія Дзялошинського-Морія протидіє димеризації, зменшуючи значення димеризаційного параметра і критичного поля, яке руйнує димеризований стан, якщо вона не змінюється від вузла до вузла. Якщо ж взаємодія Дзялошинського-Морія залежить від міжвузлової відстані, подібно до ізотропної обмінної взаємодії, то вона може сприяти димеризації. Взаємодія Дзялошинського-Морія має подібний вплив на спін-пайєрлсову димеризацію і у ланцюжку Гайзенберга, який з ростом величини цієї взаємодії може уподібнюватися до ХУ ланцюжка.

7. Запропоновано метод обчислення термодинамічних функцій регулярнозмінного ланцюжка Ізинга в поперечному полі і анізотропного ХУ ланцюжка без поля, який ґрунтується на ферміонізації Йордана-Вігнера і використанні неперервних дробів.

8. Ланцюжок Ізинга в поперечному полі з регулярнозмінними параметрами виявляє квантові фазові переходи, число яких залежить від конкретних значень параметрів гамільтоніана. Критична поведінка належить до класу універсальності моделі Ізинга на квадратній ґратці; для деяких значень параметрів можливі слабші сингулярності (фазові переходи четвертого роду). Класичні регулярнозмінні спінові ланцюжки можуть виявляти плато у залежності намагніченість – поле при $T=0$.

9. Зростання анізотропії обмінної ХУ взаємодії руйнує спін-пайєрлсову димеризацію ізотропного ХУ ланцюжка в основному стані згідно з сценарієм фазового переходу першого роду.

10. Запропоновано точно розв'язувані моделі спінових ланцюжків з скорельованим діагональним і недіагональним безладом. Через скорельованість діагонального і недіагонального безладу у таких моделях може бути ненульова намагніченість у нульовому (в середньому) полі.

Точно розв'язувані моделі дозволяють тестувати наближені методи теорії неупорядкованих спінових систем.

11. Показано, як застосувати двовимірну ферміонізацію Йордана-Вігнера до спінів-1/2 анізотропної XY моделі на просторово анізотропній квадратній ґратці. У такій системі є можливим квантовий фазовий перехід із зміною анізотропії обмінної спінової взаємодії.

12. Для класу фрустрованих антиферомагнітних спінових ґраток (зокрема, ґраток квадратне кагомі і кагомі) показана їх нестійкість щодо певних дисторсій, яка може реалізуватися у достатньо сильних магнітних полях через механізм Пайерлса.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Держко О. В., Левицький Р. Р., Сороков С. І. Про розрахунок кореляційних функцій компонент спіну, взятих у різні моменти часу, для одновимірної моделі де Жена // Укр. фіз. журн. - 1990. - **35**, 9. - С. 1421-1426.

2. Держко О. В., Левицький Р. Р., Моїна А. П. Наближення комутаційних співвідношень Бозе і спектр елементарних збуджень у теорії спінових систем // Фізика конденсованих систем (Львів). - 1993. - 1. - С. 115-118.

3. Derzhko O. V., Moina A. Ph. Statistical mechanics of one-dimensional $s=1/2$ anisotropic XY model in transverse field with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // Condensed Matter Physics (L'viv). - 1994. - 3. - P. 3-32.

4. Derzhko O., Moina A. 1D $s=1/2$ anisotropic XY model in transverse field with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // Ferroelectrics. - 1994. - **153**, 1-4. - P. 49-54.

5. Derzhko O. V., Moina A. Ph. Bose commutation rule approximation in the theory of spin systems and elementary excitation spectrum // physica status solidi (b). - 1996. - **196**, 1. - P. 237-241.

6. Derzhko O., Richter J. One variation on Lloyd's theme // Phys. Lett. A. - 1996. - **222**, 5. - P. 338-344.

7. Derzhko O., Verkholyak T. One-dimensional spin-1/2 XY models as a testing ground for spin systems theory methods // physica status solidi (b). - 1997. - **200**, 1. - P. 255-263.

8. Derzhko O., Richter J. Solvable model of random spin-1/2 XY chain // Phys. Rev. B. - 1997. - **55**, 21. - P. 14298-14310.

9. Derzhko O., Verkholyak T. One exactly solvable magnetic chain with quenched randomness // Materials Science & Engineering A. - 1997. - **226-228**. - P. 745-748.

10. Derzhko O. V., Verkholyak T. M. One exactly solvable random spin-1/2 XY chain // Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv). - 1997. - **23**, 9. - P. 977-982.

11. Derzhko O., Zaburanyi O. Static susceptibilities of nonuniform and random Ising chains // *Journal of Physical Studies (L'viv)*. - 1998. - **2**, 1. - P. 128-135.
12. Derzhko O., Zaburanyi O., Tucker J. W. Initial static susceptibilities of nonuniform and random Ising chains // *J. Magn. Magn. Mater.* - 1998. - **186**, 1-2. - P. 188-198.
13. Derzhko O., Richter J. Thermodynamic properties of spin-1/2 transverse XY chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction: Exact solution for correlated Lorentzian disorder // *Phys. Rev. B*. - 1999. - **59**, 1. - P. 100-103.
14. Derzhko O. Magnetic properties of periodic nonuniform spin-1/2 XX chains in a random Lorentzian transverse field // *Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv)*. - 1999. - **25**, 6. - P. 575-581.
15. Derzhko O., Richter J., Zaburanyi O. The spin-1/2 transverse XX chain with regularly alternating bonds and fields // *Phys. Lett. A*. - 1999. - **262**, 2,3. - P. 217-225.
16. Derzhko O., Richter J., Derzhko V. Thermodynamics of the $s=1/2$ transverse XX chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the presence of correlated Lorentzian disorder // *Annalen der Physik (Leipzig)*. - 1999. - **8**, Special Issue. - P. SI-49-SI-52.
17. Derzhko O., Richter J., Zaburanyi O. Spin-1/2 periodic nonuniform XX chains and the spin-Peierls instability // *Acta Physica Polonica A*. - 2000. - **97**, 5. - P. 931-934.
18. Derzhko O., Richter J., Zaburanyi O. Thermodynamic properties of the periodic nonuniform spin-1/2 isotropic XY chains in a transverse field // *Physica A*. - 2000. - **282**, 3-4. - P. 495-524.
19. Derzhko O., Richter J., Zaburanyi O. Spin-Peierls instability in a quantum spin chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // *J. Phys.: Condens. Matter*. - 2000. - **12**, 40. - P. 8661-8668.
20. Derzhko O., Richter J., Zaburanyi O. Local magnetic properties of periodic nonuniform spin-1/2 XX chains // *J. Magn. Magn. Mater.* - 2000. - **222**, 1-2. - P. 207-218.
21. Derzhko O. The ground state properties of the spin-1/2 transverse Ising chain with periodically varying bonds and fields // *J. Phys. A*. - 2000. - **33**, 48. - P. 8627-8634.
22. Derzhko O. Magnetization processes in quantum spin chains with regularly alternating intersite interactions // *Укр. фіз. журн.* - 2001. - **46**, 7. - С. 762-767.
23. Derzhko O. Jordan-Wigner fermionization for spin-1/2 systems in two dimensions: A brief review // *Journal of Physical Studies (L'viv)*. - 2001. - **5**, 1. - P. 49-64.
24. Derzhko O., Richter J., Verkholyak T. Jordan-Wigner fermions and the spin-1/2 anisotropic XY model on a square lattice // *Acta Physica Polonica B*. - 2001. - **32**, 10, Special Issue. - P. 3427-3432.
25. Derzhko O., Richter J., Verkholyak T. 2D quantum spin models and Jordan-Wigner fermions // *Czechoslovak Journal of Physics*. - 2002. - **52**, Supplement A. - P. A41-A44.

26. Derzhko O. Quantum spin chains with regularly alternating bonds and fields // Czechoslovak Journal of Physics. - 2002. - **52**, Supplement A. - P. A277-A280.
27. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Magnetization processes in quantum spin chains with regularly varying exchange interactions and fields // J. Magn. Magn. Mater. - 2002. - **242-245**, P2. - P. 1044-1046.
28. Держко О., Забуранний О. Регулярнозмінний спін-1/2 ланцюжок Ізінга в поперечному полі. Термодинамічні властивості // Укр. фіз. журн. - 2002. - **47**, 6. - С. 599-602.
29. Derzhko O. There is life in the old horse yet or what else we can learn studying spin-1/2 XY chains // Condensed Matter Physics (L'viv). - 2002. - **5**, 4(32). - P. 729-749.
30. Derzhko O., Verkholyak T., Schmidt R., Richter J. Square-lattice $s=1/2$ XY model and the Jordan-Wigner fermions: The ground-state and thermodynamic properties // Physica A. - 2003. - **320**. - P. 407-428.
31. Richter J., Derzhko O., Schulenburg J. Magnetic-field induced spin-Peierls instability in strongly frustrated quantum spin lattices: Preprint / NAS of Ukraine. Institute for Condensed Matter Physics; ICMP-03-29E. – L'viv: 2003. - 13 p.
32. Derzhko O., Verkholyak T. Jordan-Wigner fermions and dynamic probes of quantum spin chains // Proceedings of Institute of Mathematics of NAS of Ukraine. - 2004. - **50**, 2. - P. 692-699.
33. Derzhko O. Quantum phase transitions in alternating transverse Ising chains // Order, Disorder and Criticality. Advanced Problems of Phase Transition Theory / Ed. Yuri Holovatch. - Singapore: World Scientific, 2004. - P. 109-145.

Держко О. В. Ефекти анізотропії, регулярної неоднорідності і випадкового безладу у низьковимірних спінових моделях. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2004.

У дисертаційній роботі досліджено прояв у макроскопічних властивостях низьковимірних квантових спінових систем анізотропії, регулярної неоднорідності чи випадкового безладу мікроскопічних взаємодій чи полів, а також фрустрацій взаємодій. Дослідження виконано для одновимірних моделей (модель Ізінга, ізотропна/анізотропна XY модель, модель Гайзенберга), а також двовимірних моделей (анізотропна XY модель на квадратній ґратці, антиферромагнетик

Гайзенберга на гратках кагомі і квадратне кагомі). При цьому використано підхід, що використовує ферміонізацію Йордана-Вігнера, метод функцій Гріна, неперервні дроби, теорію спінових хвиль, точну діагоналізацію, доповнену скінченорозмірним скейлінгом. Обчислені термодинамічні величини (теплоємності, намагніченості, сприйнятливості) і динамічні величини (динамічні сприйнятливості і динамічні структурні фактори) характеризують поведінку спінових систем як при нульовій температурі так і при скінчених температурах. Досліджено процеси намагнічення при низьких температурах у розглянутих системах, структурну нестійкість Пайєрлса спінових ґраток, критичну поведінку в околі точок квантових фазових переходів.

Ключові слова: *спінові ланцюжки, скорельований безлад, двовимірні квантові спінові моделі, фрустровані квантові магнетики, взаємодія Дзялошинського-Морія, ферміонізація Йордана-Вігнера, метод функцій Гріна, спін-пайєрлсова нестійкість, квантові фазові переходи.*

Держко О. В. Эффекты анизотропии, регулярной неоднородности и случайного беспорядка в низкоразмерных спиновых моделях. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени доктора физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2004.

В диссертационной работе исследовано проявление в макроскопических свойствах низкоразмерных квантовых спиновых систем анизотропии, регулярной неоднородности или случайного беспорядка микроскопических взаимодействий или полей, а также фрустраций взаимодействий. Исследование выполнено для одномерных моделей (модель Изинга, изотропная/анизотропная XY модель, модель Гайзенберга), а также для двумерных моделей (анизотропная XY модель на квадратной решетке, антиферромагнетик Гайзенберга на решетке кагоми и квадратное кагоми). При этом использовано подход, использующий фермионизацию Йордана-Вигнера, метод функций Грина, непрерывные дроби, теорию спиновых волн, точную диагонализацию, дополненную конечноразмерным скейлингом. Рассчитанные термодинамические величины (теплоемкости, намагниченности, восприимчивости) и динамические величины (динамические восприимчивости и динамические структурные факторы) характеризуют поведение спиновых систем как при нулевой температуре так и при конечных температурах. Исследовано процессы намагничивания при низких температурах в рассматриваемых системах,

структурную неустойчивость Пайерлса спиновых решеток, критическое поведение в окрестности точек квантовых фазовых переходов.

Ключевые слова: спиновые цепочки, скорелированный беспорядок, двухмерные квантовые спиновые модели, фрустрированные квантовые магнетики, взаимодействие Дзялошинского-Мория, фермионизация Йордана-Вигнера, метод функций Грина, спин-пайерлсова неустойчивость, квантовые фазовые переходы.

Derzhko O. V. Effects of anisotropy, regular nonuniformity and random disorder in low-dimensional spin models. – Manuscript.

Thesis for the defending of the scientific degree of doctor of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, L'viv, 2004.

The dissertation is devoted to the study of the effects of anisotropy, regular alternation, random disorder of the microscopic interactions and fields on the macroscopic properties of the low-dimensional quantum spin systems. The models considered include the Ising, isotropic/anisotropic XY and Heisenberg chains, the square-lattice anisotropic XY model and the Heisenberg antiferromagnetic model on the square-kagome and kagome lattices. The methods used include the Jordan-Wigner fermionization, the Green functions approach as well as the spin wave theory and the exact diagonalization supplemented by finite-size scaling.

Using linear response theory the exact results for the initial static susceptibilities of nonuniform spin-1/2 Ising chains have been derived. These results permitted us to study the temperature dependence of the static susceptibility tensor of the regularly alternating and random-bond Ising chains discussing, in particular, the effects of nonuniformity and disorder on the low-temperature dependence of the longitudinal and transverse static susceptibilities.

We have examined the effects of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the dynamic properties of the spin-1/2 XY chain in a transverse field calculating the zz dynamic susceptibility for arbitrary temperatures and fields and the xx (yy) and xy (yx) dynamic structure factors for the isotropic XY chain at zero temperature in a strong (transverse) magnetic field. Our results demonstrate how the Dzyaloshinskii-Moriya interaction manifests itself in the dynamic properties of quantum spin chains. Our findings may be useful for experimental determining of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the corresponding compounds.

We have elaborated the continued fraction approach for the study of the isotropic XY chain in a transverse field, the transverse Ising chain, and the anisotropic XY chain without the field with regularly varying Hamiltonian parameters. The suggested approach permits one to obtain analytically the thermodynamic functions of the mentioned quantum spin chains for an arbitrary period of alternation. We have used our findings for the ground-state and thermodynamic quantities to examine the magnetization processes in the quantum spin chains, the effects of the transverse field, of the exchange XY interaction anisotropy, and of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the spin-Peierls instability. We have also examined the effects of the regularly alternating Hamiltonian parameters on the quantum phase transitions inherent in the uniform models. We have discussed the magnetization processes in the classical counterparts of the regularly alternating quantum spin chains contrasting the quantum and classical effects.

We have suggested new exactly solvable models of random quantum spin chains with correlated off-diagonal and diagonal disorders. Such chains may exhibit a nonzero average magnetization in the zero average magnetic field. This interesting property arises owing to the imposed relation between the random exchange interactions (off-diagonal disorder) and the on-site fields (diagonal disorder).

We have applied the two-dimensional Jordan-Wigner transformation to reformulate the square-lattice spin-1/2 anisotropic XY model in terms of noninteracting spinless fermions and have examined the ground-state and thermodynamic properties of this spin system. We have also performed the linear spin-wave theory calculations and the exact diagonalization for finite lattices (up to 36 sites) supplemented by finite-size scaling to discuss the effects of the spatial and the exchange interaction anisotropies on the ground-state and thermodynamic properties of the spin model under consideration. We have paid special attention to the quantum phase transition driven by the exchange interaction anisotropy and appearance/disappearance of the zero-temperature magnetization in the quasi-one-dimensional limit.

For a class of frustrated antiferromagnetic spin lattices (in particular, the square-kagome and kagome lattices) we have discussed the impact of the localized magnon states on the stability of the lattice against distortions. We have demonstrated the possibility of a spin-Peierls lattice instability which occurs only for high magnetic fields and thus might be driven by magnetic field. We have discussed the hysteresis phenomena which accompany this structural instability.

Key words: *spin chains, correlated disorder, two-dimensional quantum spin models, frustrated quantum magnets, Dzyaloshinskii-Moriya interaction, Jordan-Wigner fermionization, Green functions approach, spin-Peierls instability, quantum phase transitions.*
