

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

ЗАБУРАННИЙ Олесь Володимирович

УДК 538.955-405

**Статистична механіка магнітних ланцюжків
з регулярною неоднорідністю і випадковим безладом**

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т

дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

ЛЬВІВ – 2002

Дисертацією є рукопис

Роботу виконано в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України

- Науковий керівник – кандидат фізико-математичних наук, старший науковий співробітник, Держко Олег Володимирович, Інститут фізики конденсованих систем НАН України, м. Львів
- Офіційні опоненти – доктор фізико-математичних наук, професор кафедри фізики Лукіянець Богдан Антонович, Національний університет “Львівська політехніка”
- кандидат фізико-математичних наук, доцент кафедри теоретичної фізики Ткачук Володимир Михайлович, Львівський національний університет ім. Івана Франка
- Провідна організація – Інститут теоретичної фізики ім. М.М.Боголюбова НАН України, відділ астрофізики і елементарних частинок, м. Київ

Захист відбудеться “ ” 2002 року о “15³⁰” 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 “ ” 2002 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01,
кандидат фіз.-мат. наук

Т.Є.Крохмальський

ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

Актуальність теми. Зростання інтересу до неоднорідних одновимірних магнітних моделей із локалізованими магнітними моментами (спінові моделі) спричинено як недавніми успіхами в матеріалознавстві, так і новими теоретичними результатами. Серед нових теоретичних досягнень треба виділити гіпотезу про квантування намагніченості у регулярно неоднорідних спінових ланцюжках з аксіальною симетрією (M. Oshikawa, M. Yamanaka, I. Affleck, *Phys. Rev. Lett.* **78**, 1984 (1997)). Ця гіпотеза викликала цілий ряд експериментальних і теоретичних робіт на своє підтвердження. Недавно з'явилися також роботи про магнітні властивості спінових моделей на одновимірних надгратках (J.P. de Lima, L.L. Goncalves, cond-mat/0111372) і декорованих спінових ланцюжків (J. Strecka, M. Jascur, cond-mat/0202108). Одновимірні спінові моделі є також добрими системами для вивчення квантових фазових переходів (S. Sachdev, *Science*, **288**, 475 (2000)).

Нові експериментальні роботи у фізиці квантового магнетизму стосуються спін-Пайєрлсового переходу в квазіодновимірній сполуці CuGeO_3 (J.P. Boucher, L.P. Regnault, *J.Phys. I* **6**, 1939 (1996)). Останнім часом стало можливим експериментально дослідити локальні магнітні властивості (G.S. Uhrig, F. Schoenfeld, J.P. Boucher, M. Horvatic, *Phys. Rev. B* **60**, 9468 (1999)). Окрім того синтезовано і почалося дослідження квазіодновимірної сполуки Cs_2CoCl_4 , магнітні властивості якої успішно описані добре вивченим одновимірним спін-S XY гамільтоніаном (M. Kenzelmann і інші, cond-mat/0203070).

Мета і задачі дослідження. Метою роботи є теоретичний опис неоднорідних спінових систем. Основне завдання - вивчення впливу регулярної неоднорідності і випадкового безладу на термодинамічні властивості спін-S ланцюжків, а саме:

- Обчислення тензора статичних (початкових) сприйнятливостей для неоднорідної одновимірної спін-S моделі Ізинга. Вивчення впливу регулярної неоднорідності і випадкового безладу обмінних взаємодій на компоненти тензора статичних (початкових) сприйнятливостей.
- Вивчення впливу регулярної неоднорідності обмінних взаємодій і поперечних полів на термодинамічні властивості одновимірної спін-S XY моделі. Дослідження впливу випадкового (лоренцового) поперечного поля на термодинамічні властивості цієї системи.
- Дослідження спін-Пайєрлсової нестійкості та впливів на неї зовнішнього (поперечного) поля і додаткової міжвузлової взаємодії Дзялошинського-Морія.
- Аналіз локальних магнітних властивостей регулярно змінного спін-S XY ланцюжка. Тестування кластерного підходу для наближеного обчислення низькотемпературних намагніченостей.

- Вивчення впливу регулярної неоднорідності обмінних взаємодій і поперечних полів на поведінку одновимірної спіні-S моделі Ізинга в поперечному полі. Дослідження критичної поведінки моделі з регулярно неоднорідними параметрами.

Наукова новизна одержаних результатів. В теорії лінійного відгуку отримано вираз для усіх компонент тензора статичних (початкових) сприйнятливостей неоднорідного спіні-S ланцюжка Ізинга. Отриманий результат дозволяє вивчити випадок моделей з регулярно неоднорідними обмінними взаємодіями великих періодів і у частковому випадку узгоджується з одержаним раніше іншим способом (T.Idogaki, M.Rikitoku, J.W.Tucker, *J.Magn.Magn.Mater.* **152**, 311 (1996)). З'ясовано механізм зміни критичної поведінки сприйнятливості при введенні в систему безладу обмінних взаємодій.

Застосовано підхід неперервних дробів для строгого вивчення термодинаміки періодичної одновимірної спіні-S XY моделі. Знайдено локальні намагніченості у регулярно неоднорідному спіновому ланцюжку. Вивчено вплив зовнішнього (поперечного) поля на спіні-Пайєрлсів перехід в одновимірній XY моделі; результати підсумовано у вигляді фазової діаграми. Досліджено вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на спіні-Пайєрлсову нестійкість. Вивчено вплив неоднорідного діагонального (лоренцового) безладу на термодинамічні властивості XY ланцюжка.

Показано еквівалентність неоднорідного спіні-S анізотропного XY ланцюжка без поперечного поля та неоднорідного спіні-S ланцюжка Ізинга в поперечному полі. Виявлено можливість появи нових точок квантових фазових переходів із зміною поперечного поля для спіні-S ланцюжка Ізинга в регулярно неоднорідному поперечному полі. Досліджено критичну поведінку при квантових фазових переходах у регулярно неоднорідних спіні-S ланцюжка Ізинга у поперечному полі.

Практичне і наукове значення одержаних результатів. Отримані у роботі строгі результати дозволяють з'ясувати межі застосовності наближених підходів. Дослідження процесів низькотемпературного намагнічення у спіні-S XY ланцюжку є прикладом, на якому можна перевірити гіпотезу Ошікави, Яманаки і Афлека про квантування намагніченості, зроблене із загальних симетрійних міркувань. Вивчене кластерне наближення може бути застосоване до моделей, для яких невідомі точні результати у неоднорідному випадку.

Фазова діаграма для спіні-Пайєрлсового переходу у спіні-S XY моделі може бути корисною для якісного тлумачення результатів, відомих для реальних сполук. Результати обчислення термодинамічних функцій для регулярно неоднорідного спіні-S ланцюжка Ізинга в поперечному полі, а також термодинамічна еквівалентність з відповідним регулярно неоднорідним спіні-S

анізотропним XY ланцюжком без поперечного поля дозволяє вивчити вплив анізотропії на спін-Пайерлсову нестійкість. Запропонований підхід робить можливим дослідження нестійкості щодо утворення складніших (ніж димеризація) просторових дисторсій ґратки, зумовлених механізмом Пайерлса. Знайдений строго тензор статичних (початкових) сприйнятливостей представляє приклад, що з'ясовує математичний механізм зміни критичної поведінки при наявності домішок.

Окрім теоретичного інтересу і цінності для якісного пояснення експерименту, результати дисертаційної роботи можуть бути корисними для кількісного порівняння з експериментальними даними для Cs_2CoCl_4 (Kenzelmann M. та інші, cond-mat/0203070). Ця квазіодновимірна сполука описується сильно анізотропним спін-S гамільтоніаном Гайзенберга, що близький до XY гамільтоніана. Отримані в роботі локальні намагніченості є цікавими з огляду на недавні роботи, де такі намагніченості вдалось вивчити експериментально для квазіодновимірних сполук методами ядерного магнітного резонансу (G.S. Uhrig, F. Schoenfeld, J.-P. Boucher, M. Horvatic, *Phys. Rev. B* **60**, 9468 (1999)).

Особистий внесок здобувача. У роботах [1,2], що підсумовують результати другого розділу дисертаційної роботи, автор брав участь у аналітичному обчисленні тензора статичних (початкових) сприйнятливостей та їх чисельному аналізі. Разом із співавторами він обговорював вплив регулярної неоднорідності на температурну поведінку тензора сприйнятливостей.

В роботах [3-8], що відповідають результатам третього розділу, автор з використанням програм символічних перетворень отримав термодинамічні функції регулярно неоднорідного спін-S XY ланцюжка. Для спін-Пайерлсового переходу автор збудував фазову діаграму у площині жорсткість ґратки – поле. Він виконав обчислення локальних намагніченостей в регулярно неоднорідному XY ланцюжку і порівняв з наближеними результатами, отриманими в кластерному наближенні.

Результати четвертого розділу опубліковано в роботах [9-10], у яких автору належить дослідження питання про кількість точок квантових фазових переходів спін-S ланцюжка Ізинга в поперечному полі в залежності від ступеня неоднорідності. Крім того автор з'ясовував критичну поведінку в регулярно неоднорідній моделі.

Автор брав участь у обговоренні всіх результатів із співавторами робіт [1-10].

Апробація роботи. Основні результати дисертації доповідались і обговорювались на таких конференціях: Міжнародна конференція студентів-фізиків (Відень, Австрія, 1997 р.), Міжнародна робоча нарада з фізики конденсованих систем INTAS-Україна (Львів, 1998 р.), Європейська конференція з магнітних матеріалів і застосувань ЕММА-2000 (Київ, 2000 р.), Міжнародна

конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРІКА-2001 (Львів, 2001 р.), Всеукраїнська конференція молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРІКА-2002 (Львів, 2002 р.) а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем Національної академії наук України та відділу теорії модельних спінових систем цього інституту.

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 15 робіт, в тому числі 10 статей в наукових журналах передбачених переліками ВАК України. Перелік основних публікацій подано в кінці автореферату.

Структура та об'єм дисертації. Дисертаційна робота складається із вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел; кожен розділ дисертації починається із вступу та завершується висновками. Робота викладена на 112 сторінках (разом з літературою – 121 сторінка), включає бібліографічний список, що містить 108 найменувань у вітчизняних та закордонних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обґрунтовано актуальність досліджень, викладених у дисертації, сформульовано мету роботи, відзначено її наукову новизну.

У **першому розділі** подано короткий опис спінових моделей, оглянуто основні методи і результати теоретичних досліджень. Розглянуто проблеми, які виникають при дослідженні неоднорідних систем, наведено огляд літератури, що стосується теми дисертації.

Другий розділ називається “Статична сприйнятливість неоднорідних спінів-S ланцюжків Ізинга”. У ньому наводяться результати досліджень впливу регулярної неоднорідності і випадкового безладу на температурну залежність статичних сприйнятливостей спінів-S одновимірної моделі Ізинга. Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = H_0 + h_\alpha \sum_{j=1}^N s_j^\alpha, \quad H_0 = \sum_{j=1}^N J_j s_j^x s_{j+1}^x, \quad (1)$$

де J_j — константа обмінної взаємодії між вузлами j та $j+1$, h_α — зовнішнє поле ($\alpha=x,y,z$). Наша задача полягає у дослідженні впливу неоднорідності обмінної взаємодії на тензор статичних (початкових, тобто при полі яке прямує до нуля) сприйнятливостей $\chi_{\beta\alpha}$. Виходячи з означення

$\chi_{\beta\alpha}(h_\alpha) = \frac{\partial m_\beta}{\partial h_\alpha}$, в теорії лінійного відгуку статичні сприйнятливості запишемо через кореляційні

функції

$$\chi_{\beta\alpha}(h_\alpha) = -\frac{1}{kT} \frac{1}{N} \sum_{n,p=1}^N \left[\int_0^1 d\tau \langle s_n^\beta \left\langle \frac{i\tau}{T} \right\rangle s_p^\alpha \rangle - \langle s_n^\beta \rangle \langle s_p^\alpha \rangle \right]. \quad (2)$$

Оскільки ми розглядаємо початкові сприйнятливості, то при обчисленні кореляційних функцій в (2) усереднюємо з гамільтоніаном H_0 . Такі середні будемо позначати надалі з індексом 0: $\langle \dots \rangle_0$. Таким чином задачу зведено до знаходження двоспінових кореляційних функцій для моделі Ізинга у відсутності поля. З симетрійних міркувань випливає, що $\chi_{xy} = \chi_{xz} = \chi_{yx} = \chi_{yz} = \chi_{zx} = \chi_{zy} = 0$, а $\chi_{yy} = \chi_{xx}$. Обчислимо відмінні від нуля компоненти тензора статичних сприйнятливостей, поперечну χ_{zz} і поздовжню χ_{xx} . Використовуючи тотожності Ван-дер-Вардена для спіну S, ми отримали

$$\begin{aligned} \chi_{zz} = & -\frac{1}{N} \sum_{j,n=1}^N \left\{ \langle s_j^z s_n^z \rangle_0 \left[\frac{\sinh \frac{J_n + J_{n-1}}{2T}}{J_n + J_{n-1}} + \frac{\sinh \frac{J_n - J_{n-1}}{2T}}{J_n - J_{n-1}} \right] + 4 \langle s_j^z s_n^z s_{n-1}^x s_{n+1}^x \rangle_0 \left[\frac{\sinh \frac{J_n + J_{n-1}}{2T}}{J_n + J_{n-1}} - \frac{\sinh \frac{J_n - J_{n-1}}{2T}}{J_n - J_{n-1}} \right] \right. \\ & \left. + 2i \langle s_j^z s_n^y s_{n+1}^x \rangle_0 \left[\frac{\cosh \frac{J_n + J_{n-1}}{2T} - 1}{J_n + J_{n-1}} + \frac{\cosh \frac{J_n - J_{n-1}}{2T} - 1}{J_n - J_{n-1}} \right] + 2i \langle s_j^z s_n^y s_{n-1}^x \rangle_0 \left[\frac{\cosh \frac{J_n + J_{n-1}}{2T} - 1}{J_n + J_{n-1}} - \frac{\cosh \frac{J_n - J_{n-1}}{2T} - 1}{J_n - J_{n-1}} \right] \right\}, \\ \chi_{xx} = & -\frac{1}{T} \frac{1}{N} \sum_{j,n=1}^N \langle s_n^x s_p^x \rangle_0. \end{aligned} \quad (3)$$

Багатоспінові кореляційні функції у виразі (3) після використання комутаційних співвідношень для спінових операторів переписуються через відомі двоспінові кореляційні функції

Рис.1. Температурна залежність поздовжньої сприйнятливості χ_{xx} . (а) для бімодального безладу $p(J_n) = c\delta(J+0.3) + (1-c)\delta(J-1.0)$; 1-c=0.0, 2-c=0.5, 3-c=1.0, 4-регулярно змінний ланцюжок $J_1 J_2 J_1 J_2 \dots$, $J_1=1.0$, $J_2=-0.3$. (б) для безладу $p(J_n) = c\delta(J-0.3) + (1-c)\delta(J-1.0)$; 1-c=0.0, 2-c=0.5, 3-c=1.0, 4-регулярно змінний ланцюжок $J_1 J_2 J_1 J_2 \dots$, $J_1=1.0$, $J_2=0.3$. (в) для гаусового безладу $p(J_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(J_n - J_0)^2}{2\sigma^2}\right)$; $J_0=-1$ (криві 1-5); $J_0=1$ (криві 6-10); 1,6- $\sigma^2=0.0$, 2,7- $\sigma^2=0.2$, 3,8- $\sigma^2=0.5$, 4,9- $\sigma^2=1.0$, 5,10- $\sigma^2=5.0$. Штрих-пунктирна лінія – сприйнятливості парамагнетика (невзаємодіючі спіни).

$$\langle s_n^x s_p^x \rangle_0 = \frac{1}{4} \prod_{j=n}^{p-1} \tanh\left(\frac{J_j}{4T}\right). \text{ Врахувавши це, отримаємо вирази для поперечної і поздовжньої}$$

сприйнятливостей

$$\chi_{zz} = -\frac{1}{2N} \sum_{n=1}^N \left[\frac{\tanh \frac{J_{n-1}+J_n}{4T}}{J_{n-1}+J_n} + \frac{\tanh \frac{J_{n-1}-J_n}{4T}}{J_{n-1}-J_n} + \tanh \frac{J_n}{4T} \tanh \frac{J_{n-1}}{4T} \left(\frac{\tanh \frac{J_{n-1}+J_n}{4T}}{J_{n-1}+J_n} + \frac{\tanh \frac{J_{n-1}-J_n}{4T}}{J_{n-1}-J_n} \right) \right],$$

$$\chi_{xx} = -\frac{1}{4T} \sum_{j,n=1}^N \left[1 + \frac{2}{N} \sum_{j=1}^{N-1} \sum_{n=j}^{N-1} \left(-\tanh \frac{J_j}{4T} \right) \left(-\tanh \frac{J_{j+1}}{4T} \right) \dots \left(-\tanh \frac{J_{j+2}}{4T} \right) \right]. \quad (4)$$

Числові розрахунки для (4) проведено у двох випадках: регулярної неоднорідності або випадкового безладу обмінних взаємодій.

У першому випадку константа взаємодії J_n у гамільтоніані H_0 є періодичною величиною $J_1 J_2 \dots J_p J_1 J_2 \dots J_p \dots$. Нами досліджено випадок неоднорідності з періодом 2, коли у (1) фігурує послідовність $J_1 J_2 J_1 J_2 \dots$. Аналітичний вираз для χ_{zz} збігається з недавнім результатом (T.Idogaki, M.Rikitoku, J.W.Tucker, *J.Magn.Magn.Mater.* **152**, 311 (1996)), що отриманий з використанням іншого підходу на основі тотожностей Калена. Відзначимо, що для поперечної сприйнятливості χ_{xx} результат не залежить від знаків обмінних взаємодій.

У другому випадку міжспінові взаємодії є випадковими величинами, що задаються

розподілом ймовірності $p(J_n)$.

Було вивчено гаусів, лоренців

і бімодальний розподіли

$p(J_n)$. Для поздовжньої

сприйнятливості χ_{xx}

відхилення від однорідності

може приводити до якісної

зміни критичної поведінки.

Так, введення гаусового чи

лоренцового безладу змінює

поведінку сприйнятливості з

феро- чи антиферомагнітного

Рис.2. Температурна залежність поперечної сприйнятливості χ_{zz} . (а) для безладу $p(J_n)=c\delta(J-0.7)+(1-c)\delta(J-1.0)$; $1-c=0$, $2-c=0.25$, $3-c=0.5$, $4-c=0.75$, $5-c=1$; штрихована крива – регулярно змінний ланцюжок $J_1=1.0$, $J_2=0.7$. (б) для гаусового безладу $p(J_n) = \frac{1}{\sqrt{2\pi\sigma}} \exp\left(-\frac{(J_n-1.0)^2}{2\sigma^2}\right)$; $1-\sigma^2=0.0$, $2-\sigma^2=0.1$, $3-\sigma^2=0.2$, $4-\sigma^2=0.5$, $5-\sigma^2=1.0$, $6-\sigma^2=2.0$, $7-\sigma^2=4.0$.

типу на поведінку парамагнітного типу $\chi_{xx} \sim 1/T$ (див. рис. 1в). Для бімодального розподілу $p(J_n)=c\delta(J-J_1)+(1-c)\delta(J-J_2)$, коли знаки J_1 та J_2 однакові, критична поведінка залишається незмінною (див. рис. 1а,б). На рис.2а проілюстровано різницю поперечної сприйнятливості для регулярно неоднорідного ланцюжка Ізинга і хаотичного ланцюжка Ізинга.

Третій розділ має назву “Термодинаміка регулярно неоднорідних спінів-S XY ланцюжків”.

Усі результати, отримані у цьому розділі, ґрунтуються на використанні перетворення Йордана-Вігнера, що зводить задачу дослідження термодинамічних властивостей спінового ланцюжка до вивчення термодинамічних властивостей одновимірної системи невзаємодіючих безспінових

ферміонів. Ми розглядаємо випадок, коли як обмінні взаємодії, I_n так і поперечне поле Ω_n змінюються вздовж ланцюжка, так що гамільтоніан системи має вигляд

$$H = 2 \sum_{n=1}^N I_n \left(s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y \right) + \sum_{n=1}^N \Omega_n s_n^z. \quad (5)$$

Після ферміонізації Йордана-Вігнера гамільтоніан набуває вигляду

$$H = \sum_{n=1}^N I_n \left(c_{n+1}^+ - c_n c_{n+1}^+ \right) + \sum_{n=1}^N \Omega_n \left(c_n^+ - \frac{1}{2} \right). \quad (6)$$

Для дослідження термодинаміки моделі з гамільтоніаном (6) використовується формалізм двочасових температурних функцій Гріна (Зубарева) $\left\langle \left\langle c_n | c_m^+ \right\rangle \right\rangle_{n,m}^\mp = \mp i \hbar \theta(\pm t) \left\langle c_n^\dagger(t), c_m^+(0) \right\rangle$,

$G_{m,n}^\mp(\omega \pm i\varepsilon) = \int_{-\infty}^{\infty} dt e^{-i(\omega \pm i\varepsilon)t} \left\langle \left\langle c_n | c_m^+ \right\rangle \right\rangle_{n,m}^\mp$, (далі $\hbar=1$). Знаючи діагональні функції Гріна, можемо знайти

щільність станів $\rho(\omega) = \mp \frac{1}{\pi N} \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \sum_{n=1}^N \text{Im} G_{n,n}^\mp(\omega \pm i\varepsilon)$, вільну енергію $f = -T \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \rho(\omega) \ln(2 \cosh \frac{\omega}{2T})$ і решту

термодинамічних функцій. Для знаходження діагональних функцій Гріна, ми представили розв'язок рівнянь руху для них через неперервні дроби

$$G_{n,n}^\mp(\omega \pm i\varepsilon) = \frac{1}{\omega \pm i\varepsilon - \Omega_n - \Delta_n^- - \Delta_n^+}, \quad (7)$$

$$\Delta_n^- = \frac{I_{n-1}^2}{\omega \pm i\varepsilon - \Omega_{n-1}^2 - \frac{I_{n-2}^2}{\omega \pm i\varepsilon - \Omega_{n-2}^2 - \dots}}, \quad \Delta_n^+ = \frac{I_n^2}{\omega \pm i\varepsilon - \Omega_{n+1}^2 - \frac{I_{n+1}^2}{\omega \pm i\varepsilon - \Omega_{n+2}^2 - \dots}}. \quad (8)$$

Рис. 3. Зони дозволених енергій (темні області) ферміонів Йордана-Вігнера для неоднорідного спін-S XY ланцюжка. (а) період неоднорідності 2: $\Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \Omega_1 I_1 \dots$, $\Omega_1 = \Omega + \Delta\Omega$, $\Omega_2 = \Omega - \Delta\Omega$, $I_1 = I_2 = 1$. (б) період неоднорідності 3: $\Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \Omega_3 I_3 \Omega_1 I_1 \dots$, $\Omega_1 = \Omega + \Delta\Omega$, $\Omega_2 = \Omega + 1$, $\Omega_3 = \Omega - \Delta\Omega - 1$, $I_1 = I_2 = I_3 = 1$. (в) період неоднорідності 12: $\Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \dots \Omega_{12} I_{12} \Omega_1 I_1 \dots$, $\Omega_1 = \dots = \Omega_6 = \Omega + \Delta\Omega$, $\Omega_7 = \dots = \Omega_{12} = \Omega - \Delta\Omega$, $I_1 = \dots = I_{12} = 1$.

У випадку періодичної неоднорідності вирази (8) стають квадратними рівняннями для Δ_n^\pm , розв'язавши які, ми можемо записати функції Гріна (7) явно. Перевагою цього методу є можливість вивчити великі періоди неоднорідності. Наслідком регулярної неоднорідності є розщеплення дозволених енергій ферміонів Йордана-Вігнера (які у однорідному випадку

утворюють одну зону) на кілька підзон, кількість яких не перевищує періоду неоднорідності, що проілюстровано на рис. 3.

Розбиття зони дозволених енергій на кілька підзон зумовлює виникнення в залежності намагніченості від поперечного поля (при нульовій температурі) горизонтальних ділянок (плато), що обмежені критичними полями Ω_c . При критичному полі Ω_c намагніченість має злам, а сприйнятливості розбігається за законом $\chi^{zz}(\Omega) \sim (\Omega - \Omega_c)^{-1/2}$ (див. рис. 4). Висоти плато не залежать від числових значень параметрів у гамільтоніані, а визначаються лише періодом неоднорідності, що узгоджується з гіпотезою Ошікави, Яманакі і Афлека. Регулярна неоднорідність може спричинити ненульову намагніченість при нульовому середньому полі. Нові властивості виникають в інших термодинамічних функціях, наприклад, додаткові максимуми у температурних залежностях теплоємності чи сприйнятливості.

Рис. 4. Намагніченість при нульовій температурі неоднорідного спін-S XY ланцюжка з періодом неоднорідності $p=3$, $\Omega_1 I_1 \Omega_2 I_2 \Omega_3 I_3 \Omega_1 I_1 \dots$, $\Omega_1 = \Omega + \Delta\Omega_1$, $\Omega_2 = \Omega + \Delta\Omega_2$, $\Omega_3 = \Omega - \Delta\Omega_1 - \Delta\Omega_2$, $I_1 = 1 + \Delta I_1$, $I_2 = 1 + \Delta I_2$, $I_3 = 1 - \Delta I_1 - \Delta I_2$. Криві 1 - $\Delta I_1 = \Delta I_2 = 0$, $\Delta\Omega_1 = \Delta\Omega_2 = 0$; 2 - $\Delta I_1 = \Delta I_2 = 0$, $\Delta\Omega_1 = 2$, $\Delta\Omega_2 = 1$; 3 - $\Delta I_1 = 0.5$, $\Delta I_2 = 0$, $\Delta\Omega_1 = 0$, $\Delta\Omega_2 = 1$; 4 - $\Delta I_1 = -0.5$, $\Delta I_2 = 0.5$, $\Delta\Omega_1 = 1$, $\Delta\Omega_2 = 0$.

Використаний апарат функцій Гріна дозволяє вивчити локальні (на окремому вузлі) намагніченості m_n^z

і локальні сприйнятливості $\chi_n^z = \frac{\partial m_n^z}{\partial \Omega}$. Діагональна функція Гріна $G_{n,n}^\mp(\omega \pm i\varepsilon)$ дозволяє знайти ферміонну кореляційну функцію $\langle c_n^+ c_n \rangle$ а отже і намагніченість на вузлі n

$$m_n^z = \langle c_n^+ c_n \rangle - \frac{1}{2} = \frac{\pm 1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \lim_{\varepsilon \rightarrow 0} \text{Im} G_{n,n}^\mp(\omega \pm i\varepsilon) \tanh \frac{\beta\omega}{2} d\omega. \quad (9)$$

Рис. 5. Локальні намагніченості неоднорідного спін-S XY ланцюжка з періодом неоднорідності $p=12$. (а) – просторова конфігурація, (б) – значення локальних намагніченостей при значенні однорідного поля $\Omega=0.5, 1, 1.5, 2, 2.5$ (з низу до верху). Штрихована лінія означає $m_n^z = 0$.

Ми розглядали локальні намагніченості при регулярній неоднорідності взаємодій, що можуть виникати внаслідок просторових граткових дисторсій. Поперечне поле покладалося

однорідним (див. рис. 5).

Розвинуті точні методи обчислення кривої намагнічення при нульовій температурі можуть бути використані для перевірки наближених методів. Для неоднорідного спін-S XY ланцюжка у

кластерному наближенні знайдено локальні магнітні властивості. З'ясовано також механізм появи плато намагніченості в границі невзаємодіючих кластерів.

Використовуючи метод, розвинений для аналізу моделі Ллойда, в дисертаційній роботі вивчено вплив випадкового (лоренцового) поперечного поля на термодинамічні властивості регулярно неоднорідного спін-S XY ланцюжка. Поперечне поле є випадковим і задається щільністю розподілу $p(\Omega_n) = \frac{1}{\pi} \frac{\Gamma_n}{(\Omega_n^0 - \Omega_n)^2 + \Gamma_n^2}$. Для такої щільності розподілу знайдено

усереднену щільність станів $\overline{\rho(\omega)} = \prod_n \int_{-\infty}^{\infty} d\Omega_n p(J_n) \rho(\omega)$ і усереднені термодинамічні функції. При введенні довільно малого безладу зникають точки розбіжностей у залежності сприйнятливості від поперечного поля при $T=0$ і розмиваються плато у намагніченості при $T=0$. Якщо безлад є неоднорідним ($\Gamma_1=0, \Gamma_2=\Gamma \neq 0$), то розмивання плато є нерівномірним.

Рис. 6. Різні розв'язки для δ^* , що мінімізують енергію $\varepsilon(\delta)$ основного стану. $\varepsilon(\delta)$ має лише один мінімум $\delta \neq 0$ (область А); існує два мінімуми при $\delta \neq 0$ і $\delta=0$, перший з яких є глибшим (область В₁) чи мілкішим (область В₂); $\varepsilon(\delta)$ має мінімум лише при $\delta=0$ (область С). Всюди $I=1$.

Обчислені термодинамічні функції для регулярно неоднорідної одновимірної спін-S XY моделі дозволили вивчити спін-Пайерлсову нестійкість магнітної системи. Для того, щоб перевірити стійкість магнітного ланцюжка щодо просторової димеризації, ми обчислили енергію e_0 основного стану димеризованого (тобто з періодом неоднорідності 2) XY ланцюжка $(\Omega I_1 \Omega I_2 \Omega I_1 \dots)$, $I_{1,2}=I(1 \pm \delta)$, де δ –

параметр, що характеризує димеризацію, пов'язаний з просторовою дисторсією. Якщо поперечне поле однорідне, то остаточний вираз для енергії основного стану димеризованого спін-S XY ланцюжка набуває вигляду

$$e_0(\delta) = -\frac{1}{\pi} \left(b_1 E \left(\psi, \frac{b_1^2 - b_2^2}{b_1^2} \right) + |\Omega| \left(\frac{\pi}{2} - \psi \right) \right),$$

$$\psi = \begin{cases} 0, & \text{якщо } b_1 < |\Omega|; \\ \arcsin \sqrt{\frac{b_1^2 - \Omega^2}{b_1^2 - b_2^2}}, & \text{якщо } b_2 < |\Omega| \leq b_1; \\ \pi/2, & \text{якщо } |\Omega| \leq b_2. \end{cases} \quad (10)$$

Тут $b_1=2|I|$, $b_2=2\delta|I|$, $E(\phi, a) \equiv \int_0^\phi \sqrt{1 - a \sin^2 \varphi} d\varphi$ – еліптичний інтеграл другого роду. Пружна енергія димеризованої ґратки пропорційна до квадрату зміщення $\alpha \delta^2$, де α – константа жорсткості ґратки. В системі відбувається димеризація, коли повна енергія $\varepsilon(\delta) = e_0(\delta) + \alpha \delta^2$ має мінімум при $\delta \neq 0$ (параметр димеризації відмінний від нуля). Ми знайшли точний вираз для параметру димеризації в залежності від жорсткості ґратки і поперечного поля $\delta^* = \delta^*(\alpha, \Omega)$. При відсутності поперечного поля $\delta^* \neq 0$, і в системі реалізується димеризований стан. При збільшенні поперечного поля у

залежності $\varepsilon(\delta)$ з'являється додатковий мінімум при $\delta^*=0$, а при певному критичному полі Ω^* димеризований стан руйнується – система стає однорідною (див. рис. 6). Ми знайшли значення димеризаційного параметра δ^* і критичного поля для довільних α . Для “жорстких” ґраток (великі α) обчислення спрощуються: значення димеризаційного параметра $\delta^* = e^{\frac{\pi\alpha}{|I|}}$, а критичного поля $|\Omega^*| = 2|I|e^{\frac{\pi\alpha}{|I|}}$.

У третьому розділі вивчено також вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на спіно-Пайєрлсову димеризацію. Гамільтоніан спіно-S XY ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія D_n має вигляд

$$H = 2 \sum_{n=1}^N I_n (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + 2 \sum_{n=1}^N D_n (s_n^x s_{n+1}^y + s_n^y s_{n+1}^x) + \sum_{n=1}^N \Omega_n s_n^z. \quad (11)$$

За допомогою унітарного перетворення, ми переписали (11) через гамільтоніан спіно-S XY ланцюжка з перенормованою константою взаємодії

$$H = 2 \sum_{n=1}^N \sqrt{I_n^2 + D_n^2} (s_n^{ix} s_{n+1}^{ix} + s_n^{iy} s_{n+1}^{iy}) + \sum_{n=1}^N \Omega_n s_n^{iz} \quad (12)$$

(з точністю до неістотних для термодинамічного дослідження граничних доданків). Розглядаємо далі період неоднорідності $p=2$, покладаючи $I_{1,2}=I(1\pm\delta)$, $D_{1,2}=D(1\pm k\delta)$. Ми показали, що залежно від значення параметра k взаємодія Дзялошинського-Морія може як сприяти димеризації (збільшувати параметр димеризації δ^* , посилювати нерівність $\varepsilon(\delta^*) < \varepsilon(0)$, збільшувати значення критичного поля, яке руйнує димеризований стан) так і протидіяти їй. Для жорстких ґраток результати мають особливо простий вигляд. Так, значення димеризаційного параметра

$$\delta^* = \frac{1}{\Phi} e^{\frac{\pi\alpha}{J\Phi^2}}, \quad \text{де } J = \sqrt{I^2 + D^2}, \quad \Phi = \frac{J^2 + D^2}{J^2 + kD^2}. \quad \text{Критичне поле, яке руйнує димеризацію}$$

$|\Omega^*| = 2Je^{\frac{\pi\alpha}{J\Phi^2}}$. З цих виразів видно, що димеризаційний параметр δ^* і критичне поле Ω^* може збільшуватись з ростом D (коли $k=1$) і зменшуватись (коли $k=0$).

У **четвертому розділі** під назвою “Термодинаміка регулярно неоднорідних спіно-S ланцюжків Ізинга в поперечному полі” досліджується неоднорідний ланцюжок спінів S з гамільтоніаном

$$H = 2 \sum_{n=1}^{N-1} I_n s_n^x s_{n+1}^x + \sum_{n=1}^N \Omega_n s_n^z. \quad (13)$$

Ми розглянули унітарні перетворення гамільтоніана (13), що дозволяють при обчисленні термодинамічних функцій обмежитися додатними значеннями обмінних взаємодій і поперечних полів. Ми показали також, що термодинамічні величини не зміняться при взаємній заміні в

гамільтоніані (13) поперечних полів і взаємодій, і вивчили зв'язок між неоднорідним спін-S XY ланцюжком і неоднорідним спін-S ланцюжком Ізинга в поперечному полі. Ці результати узгоджуються з відомими раніше в однорідному випадку.

Після перетворення Йордана-Вігнера приходимо від спінового гамільтоніана (13) до гамільтоніана, що описує систему безспінових ферміонів:

$$H = \sum_{n=1}^N I_n \left(c_{n+1}^+ c_n - c_n c_{n+1}^+ + c_n^+ c_{n+1} - c_n c_{n+1} \right) + \sum_{n=1}^N \Omega_n \left(c_n^+ c_n - \frac{1}{2} \right) \quad (14)$$

Через присутність у (14) доданків $c_n^+ c_{n+1}^+$, $c_n c_{n+1}$ метод, розвинений для регулярно неоднорідної XY моделі (див. (6), (7)), незастосовний. Тим не менше вдається обчислити термодинамічні функції для моделі з гамільтоніаном (14), якщо параметри I_n і Ω_n є періодичними величинами. Відомо, що існує канонічне перетворення $\eta_k = \sum_i (g_{ki} c_i + h_{ki} c_i^+)$, яке зберігає комутаційні співвідношення

$$\left[\eta_k, \eta_p^+ \right] = \delta_{kp}, \quad \left[\eta_k, \eta_p \right] = \left[\eta_k^+, \eta_p^+ \right] = 0 \quad \text{і зводить квадратичну форму (14) до діагонального вигляду}$$

$$H = \sum_k \Lambda_k \left(\eta_k^+ \eta_k - \frac{1}{2} \right). \quad (15)$$

При цьому рівняння для лінійних комбінацій невідомих коефіцієнтів $\Phi_{ki} = g_{ki} + h_{ki}$, $\Psi_{ki} = g_{ki} - h_{ki}$ є

$$\Omega_{n-1} I_{n-1} \Phi_{k,n-1} + \left(\Omega_{n-1}^2 + \Omega_n^2 - \Lambda_k^2 \right) \Phi_{k,n} + \Omega_n I_n \Phi_{k,n+1} = 0,$$

$$\Omega_n I_{n-1} \Psi_{k,n-1} + \left(\Omega_n^2 + \Omega_n^2 - \Lambda_k^2 \right) \Psi_{k,n} + \Omega_{n+1} I_n \Psi_{k,n+1} = 0. \quad (16)$$

Розв'язки рівнянь (16) в неоднорідному випадку є невідомі. Аналогічні до (16) рівняння виникають при розв'язку задачі про спектр фононних збуджень неоднорідного ланцюжка пружно зв'язаних частинок. Ця аналогія дозволяє знайти щільність розподілу квадратів енергій елементарних збуджень $R(E^2) = \frac{1}{N} \sum_k \delta(E^2 - \Lambda_k^2)$. Термодинамічні функції спінової моделі (13) можна знайти, знаючи $R(E^2)$. Наприклад, вільна енергія Гельмгольца на один вузол $f = -2T \int_0^\infty dE E R(E^2) \ln(2 \cosh E/2T)$. Ми використали формалізм функцій Гріна і представили діагональні функції Гріна, подібно як при вивченні XY моделі через неперервні дроби. Таким чином у випадку регулярно неоднорідності термодинамічні функції спін-S ланцюжка Ізинга в поперечному полі можуть бути обчислені точно.

Спін-S ланцюжок Ізинга в поперечному полі ($I_n=I$, $\Omega_n=\Omega$) має два особливі значення поперечного поля $\Omega_c=\pm I$. При $\Omega=\Omega_c$ (точки квантових фазових переходів, $T_c=0$) енергетичний спектр спінової моделі є безщілинним, а сприйнятливість при нульовій температурі як функція поля логарифмічно розбігається $\chi^{zz}(\Omega)\sim\ln|\Omega-\Omega_c|$. У дисертаційній роботі ми вивчили точки квантових фазових переходів для моделі з регулярно неоднорідними значеннями поперечних полів і обмінних взаємодій. Наприклад, у випадку неоднорідності з періодом 2, а саме $I\Omega_1I\Omega_2I\Omega_1I\Omega_2\dots$, де $\Omega_{1,2}=\Omega\pm\Delta\Omega$, при малих відхиленнях від однорідності ($\Delta\Omega<I$) є лише два особливі значення поля $\Omega_c = \pm\sqrt{I^2 + \Delta\Omega^2}$. Коли $\Delta\Omega>I$ таких значень стає чотири: $\Omega_c = \pm\sqrt{I^2 \pm \Delta\Omega^2}$. Подібне має місце і в спін-S ланцюжку Ізинга з періодом регулярної неоднорідності $p=3$: $I\Omega_1I\Omega_2I\Omega_3\dots$, $\Omega_1=\Omega+\Delta\Omega_1$, $\Omega_2=\Omega+\Delta\Omega_2$, $\Omega_3=\Omega-\Delta\Omega_1-\Delta\Omega_2$. Тепер залежно від ступеня неоднорідності поперечного поля (який визначається параметрами $\Delta\Omega_1$, $\Delta\Omega_2$) існує два, чотири, або шість особливих значень поперечного поля (рис. 7). Виходячи із знайденого виразу для щільності квадратів енергій елементарних збуджень, ми дослідили критичну поведінку в околі точок квантових фазових переходів для довільного періоду неоднорідності. Розбіжність сприйнятливості із зміною поперечного поля є завжди логарифмічною, а теплоємність при низьких температурах $c\sim T$ (а не $c\sim e^{-1/T}$, як для всіх інших значень поперечного поля $\Omega\neq\Omega_c$). Умови для критичних точок, що впливають із знайдених виразів для $R(E^2)$, а саме $I_1I_2\pm\Omega_1\Omega_2$ (для $p=2$) і $I_1I_2I_3\pm\Omega_1\Omega_2\Omega_3$ (для $p=3$) збігаються зі встановленою раніше умовою існування в системі збуджень із нульовою енергією (P. Pfeuty, *Phys. Lett A.* **72**, 245 (1979)).

Рис. 7. Кількість критичних точок в спін-S ланцюжку Ізинга в поперечному полі з періодом неоднорідності $p=3$. $I_1=I_2=I_3=1$, $\Omega_1=\Omega_2=\Omega_3=1$, $\Omega_1=\Omega+\Delta\Omega_1$, $\Omega_2=\Omega+\Delta\Omega_2$, $\Omega_3=\Omega-\Delta\Omega_1-\Delta\Omega_2$. Двічі заштрихована область – дві критичні точки; заштрихована область – чотири; не заштрихована – шість.

Висновки.

1. Випадковий безлад міжспінових обмінних взаємодій в спін-S ланцюжку Ізинга спричиняє або не спричиняє зміну критичної поведінки поздовжньої статичної (початкової) сприйнятливості. Гаусів безлад із як завгодно малою дисперсією σ , лоренців безлад із як завгодно малою півшириною розподілу Γ , чи інший безлад, що допускає як феромагнітні взаємодії, так і антиферомагнітні взаємодії змінює критичну поведінку сприйнятливості з феромагнітного чи антиферомагнітного типу на поведінку парамагнітного типу $\chi \sim 1/T$ ($T_c=0$). Низькотемпературна поведінка поздовжньої статичної (початкової) сприйнятливості регулярно змінного ланцюжка з однаковим числом феро- і антиферомагнітних взаємодій залежить від періоду неоднорідності. Суттєво різними є температурні залежності сприйнятливостей ланцюжків з двома типами взаємодій, які з'являються або регулярно, або випадково.
2. В регулярно неоднорідному спін-S XY ланцюжку крива залежності намагніченості від поперечного поля при нульовій температурі має горизонтальні ділянки (плато), число яких не перевищує періоду неоднорідності. Плато можуть бути на висотах, що визначаються лише періодом регулярної неоднорідності і не залежать від значень обмінних взаємодій та поперечних полів. Неоднорідний лоренців безлад у поперечних полях приводить до нерівномірного розмиття плато у кривій намагніченість - поле.
3. Розраховано залежність намагніченості на окремому вузлі від поперечного поля в регулярно неоднорідному спін-S XY ланцюжку. Неоднорідність міжспінових обмінних взаємодій зумовлює виникнення просторово неоднорідних профілів намагніченості. Залежно від величини поперечного поля послідовність вузлів n_1, n_2, \dots, n_p таких, що $m_{n_1} \leq m_{n_2} \leq \dots \leq m_{n_p}$ змінюється. Порівняння локальних намагніченостей при $T=0$, отриманих точно, із такими ж намагніченостями, що отримані за допомогою кластерного наближення, визначає межі застосовності наближеного підходу сильного зв'язку.
4. Дослідження спін-Пайєрлсового переходу в спін-S XY ланцюжку за присутності неоднорідного поперечного поля показує, що поперечне поле руйнує димеризований стан. Знайдено значення поперечного поля, яке руйнує димеризований стан, залежно від жорсткості ґратки, і збудовано відповідну фазову діаграму. Показано, що взаємодія Дзялошинського-Морія може як протидіяти, так і сприяти димеризації.
5. У регулярно неоднорідному спін-S ланцюжку Ізинга при $T=0$ із зміною поперечного поля виникає ряд квантових фазових переходів, число яких залежить від ступеня неоднорідності поперечного поля і може бути $2, 4, \dots, 2p$, де p – період неоднорідності. Критичні поля Ω_c

відповідають безщільному енергетичному спектру спінової моделі (в системі з'являються збудження з нульовою енергією). Незалежно від періоду неоднорідності розбіжність сприйнятливості зі зміною поля є логарифмічною $\chi^{zz}(\Omega) \sim (\Omega - \Omega_c)^{-1/2}$, а низькотемпературна залежність теплоємності від температури при $\Omega = \Omega_c$ – лінійною.

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Derzhko O., Zaburannyi O. Static susceptibilities of nonuniform and random Ising chains. // J. Phys. Stud. – 1998. – Vol. 2, No. 1. – P.128-135.
2. Derzhko O., Zaburannyi O., Tucker J.W. Initial static susceptibilities of nonuniform and random Ising chains. // J. Magn. Magn. Matter. – 1998. – Vol. 186, No. 2. – P.188-198.
3. Derzhko O., Krokhamalskii T., Zaburannyi O. Spin-S XX chains in a transverse field with regular nonuniformity or correlated lorentzian disorder. // Cond. Matt. Phys. – 1999. – Vol. 2, No.2(18). – P.337-344.
4. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. The spin-S transverse Ising chain with regularly alternating bonds and fields. // Phys. Lett. A. – 1999. – Vol. 262. – P.217-225.
5. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Spin-S periodic XX chains and the spin-Peierls instability. // Acta Phys. Pol. A. – 2000. – Vol. 97, No.5. – P.931-934.
6. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Spin-Peierls instability in a quantum spin chain with Dzyaloshynskii-Morya interaction. // J. Phys.: Condens. Matter. – 2000. – Vol. 12. – P.8661-8668.
7. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Local magnetic properties of periodic nonuniform spin-S XX chains. // J. Magn. Magn. Matter. – 2000. – Vol. 222. – P.207-218.
8. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Thermodynamic properties of the periodic nonuniform spin-S XY chains in a transverse field. // Physica A. – 2000. – Vol. 282. – P.495-524.
9. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Magnetization processes in quantum spin chains with regularly varying exchange interactions and fields. // J. Magn. Magn. Matter. – 2002. – Vol. 242-245, p.2. – P.1046-1048.
10. Дерзко О., Забуранний О. Регулярнозмінний спін-S ланцюжок Ізінга в поперечному полі. Термодинамічні властивості. // УФЖ. – 2002. – том. 47, №6. – С.599-602.
11. Derzhko O., Zaburannyi O. Static initial susceptibilities of nonuniform and random Ising chains // International Conference for Physics Students, Vienna, August 10-17, 1997, p.21.

12. Derzhko O., Ziburanyi O. Thermodynamic properties of nonuniform spin-S XX chain in transverse field // Workshop on Condensed Matter Physics, Lviv, May 21-24, 1998, p.29.
13. Derzhko O., Richter J., Ziburanyi O. Magnetic properties of periodic nonuniform spin-S XX chains // European Magnetic Materials and Applications Conference, Kyiv, June 7-10, 2000, p.189.
14. Держко О., Забуранний О. Термодинамічні властивості неоднорідних квантових ланцюжків Ізинга // Міжнародна конференція студентів і молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРІКА-2001, Львів, травень 16-18, 2001, с.28.
15. Держко О., Забуранний О. Процеси намагнічення при низьких температурах у квантових і класичних спінових ланцюжках // Всеукраїнська конференція молодих науковців з теоретичної та експериментальної фізики ЄВРІКА-2002, Львів, травень 22-24, 2001, с.162.

Забуранный О.В. Статистична механіка магнітних ланцюжків з регулярною неоднорідністю і випадковим безладом. – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2002.

Робота присвячена впливові регулярної неоднорідності і випадкового безладу на термодинамічні властивості квантових одновимірних спінових систем. У межах підходу лінійного відгуку вивчено вплив безладу і регулярної неоднорідності на тензор початкових статичних сприйнятливостей спін-S моделі Ізинга. З допомогою ферміонізації Йордана-Вігнера, методу функцій Гріна і підходу неперервних дробів знайдено термодинамічні функції регулярно неоднорідної спін-S XY моделі в поперечному полі і регулярно неоднорідної спін-S моделі Ізинга в поперечному полі. Для XY моделі знайдено також локальні магнітні властивості, вивчено вплив поперечного поля та взаємодії Дзялошинського-Морія на спін-Пайєрлсову нестійкість. Досліджено квантові фазові переходи в регулярно змінній моделі Ізинга в поперечному полі.

Ключові слова: *спінові моделі, регулярна неоднорідність, випадковий безлад, термодинамічні функції, намагнічення, квантові фазові переходи, спін-Пайєрлсова нестійкість.*

Забуранный О.В. Статистическая механика магнитных цепочек с регулярной неоднородностью и случайным беспорядком. – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2002.

Робота посвящена изучению влияния регулярной неоднородности и случайного беспорядка на термодинамические свойства квантовых одномерных спиновых систем. В рамках теории линейного отклика изучено влияние случайного беспорядка и регулярной неоднородности на тензор начальных статических восприимчивостей спин-S модели Ізинга. С помощью фермионизации Йордана-Вигнера, метода функций Грина и метода непрерывных дробей найдены термодинамические функции регулярно неоднородной спин-S XY модели в поперечном поле и регулярно неоднородной спин-S модели Ізинга в поперечном поле. Для XY модели найдены также локальные магнитные свойства, изучено влияние поперечного поля и взаимодействия Дзялошинского-Мория на спин-Пайєрлсовую неустойчивость. Изучено квантовые фазовые переходы в регулярно неоднородной цепочке Ізинга в поперечном поле.

Ключевые слова: *спиновые модели, регулярная неоднородность, случайный беспорядок, термодинамические функции, квантовые фазовые переходы, спин-Пайєрлсовая неустойчивость.*

Zaburanyi O.V. Statistical mechanics of magnetic chains with regular nonuniformity and random disorder. – Manuscript.

Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the Ukrainian National Academy of Sciences, Lviv, 2002.

The subject of this work is the study of the thermodynamic properties of nonuniform spin-S one-dimensional models. We consider few models and two types of nonuniformity: regularly alternating nonuniformity and random disorder.

Using the linear response theory we derive exact expression for the initial static susceptibilities of a nonuniform spin-S Ising model in an external field. All off-diagonal components of the susceptibility tensor are shown to be zero. From the diagonal components only two, the longitudinal and the transverse ones, different from zero are found. Our result permits us to study the regularly alternating-bond and the random-bond Ising chains. For the longitudinal susceptibility even a small amount of randomness may lead to a qualitative difference from the nonrandom case. In the alternating-bond chain the low temperature behavior of the longitudinal susceptibility depends drastically on the alternation period. We also observe a difference between the regularly alternating chain with two types of bonds (ferro- and antiferromagnetic) and the corresponding random chain where those bonds come into play randomly.

In the present work we also consider the thermodynamic properties of the spin-S Ising chain in a transverse field. At first we consider several nonuniform unitary transformations of the Hamiltonian, which permit us to narrow a region of parameter values. In particular, we may assume all the exchange bonds and the transverse fields to be positive. We also study a relation between the thermodynamic properties of the nonuniform spin-S anisotropic XY chain and the corresponding nonuniform spin-S Ising chain in a transverse field. Using the Jordan-Wigner transformation, the Green-function approach and continued fractions we calculate exactly the density of states and hence all thermodynamic functions of the spin model. We can assume regular nonuniformity of both exchange bonds and transverse fields. It was found that in a nonuniform chain new points of quantum phase transitions may appear. In the critical points the energy gap vanishes (the spin system has zero energy excitations). The phase transitions are characterized by logarithmic singularity of the susceptibility vs. field at zero temperature and the linear dependence of the specific heat vs. temperature. The number of the quantum phase transition points depends on the period of alternation and the strength of nonuniformity.

The effects of regular nonuniformity were also studied in the spin-S XY chain in transverse field. By the Jordan-Wigner transformation we reduce the problem to the problem of one-dimensional noninteracting spinless fermions. The diagonal elements of the double-time temperature Green functions

can be written in terms of continued fractions. For regular nonuniformity of periods 2,3,4,12 the thermodynamic properties were studied in detail. Regular nonuniformity leads to a splitting of the fermion bands into several subbands, number of which does not exceed a period of nonuniformity. Due to the splitting of the fermion band into subbands a number of plateau appears in the magnetization curve (magnetization vs. field) at zero temperature. In the regularly nonuniform XY model the temperature dependence of the specific heat may exhibit a two peak structure. From the diagonal Green functions we found the local (on-site) magnetizations and the local susceptibilities. Nonuniformity of the exchange bonds leads to a spatially nonuniform magnetization profiles. We use the results for local magnetization to test the strong-coupling approximation. The strong-coupling approach can explain the existence of plateaus in the magnetization curve. The Lorentzian disorder of the transverse field leads to smeared out magnetization plateaus. Strongly nonuniform Lorentzian disorder may smear out only some of plateaus.

We found the ground-state energy of the dimerized spin-S XY chain in transverse field. This result permits us to analyze the spin-Peierls instability of the chain. We found the dependence of the dimerization parameter on the elastic constant. The transverse field destroys the dimerized state and the spin system becomes uniform. We build the phase diagram in the plane transverse field – elastic constant depicting the regions of existence of the uniform and dimerized phases and the regions where both phases coexist. We examined the influence of the Dzyaloshinskii-Moria interaction on the spin-Peierls instability. The Dzyaloshinskii-Moria interaction may either suppress or support the dimerized state of the spin-S XY chain. For “hard” lattices a simple expression based on renormalization arguments was suggested it yields the critical transverse field that destroys the dimerized phase in system.

Key words: *spin models, regular nonuniformity, random disorder, thermodynamic functions, quantum phase transition, spin-Peierls instability*