

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

БАЛІГА Василь Ярославович



УДК 537.9, 537.622

**ЕФЕКТИ ФРУСТРАЦІЙ У КВАНТОВИХ
АНТИФЕРОМАГНЕТИКАХ ГАЙЗЕНБЕРГА
НА ДВОШАРОВИХ ҐРАТКАХ**

01.04.02 – теоретична фізика

Автореферат дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2019

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України.

Науковий керівник: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник **Держко Олег Володимирович**, Інститут фізики конденсованих систем НАН України (м. Львів), завідувач відділу квантової статистики.

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник **Карнаухов Ігор Миколайович**, Інститут металофізики імені Г.В. Курдюмова НАН України (м. Київ), провідний науковий співробітник відділу теорії металічного стану;

кандидат фізико-математичних наук, доцент **Пастухов Володимир Степанович**, Львівський національний університет імені Івана Франка (м. Львів), доцент кафедри теоретичної фізики.

Захист відбудеться “15” травня 2019 року о 15 год. 30 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 дисертації розісланий “10” квітня 2019 року.

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



А.М. Швайка

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

Важливий клас спінових моделей становлять квантові антиферромагнетики Гайзенберга на двошарових ґратках: вони складаються з двох антиферромагнітних шарів з антиферромагнітною міжшаровою взаємодією між найближчими сусідами, яка за певних умов визначає димери [K. Hida, J. Phys. Soc. Jpn., 1990, **59**, 2230; L. Wang, et al. Phys. Rev. B., 2006, **73**, 014431; R. Ganesh, et al. Phys. Rev. B., 2011, **83**, 144414; R. Ganesh, et al. Phys. Rev. B., 2011, **84**, 214412]. Двошарові антиферромагнітні ґратки представляють квантові багаточастинкові системи, в яких виникають всі явища, зумовлені геометричною фрустрацією обмінних взаємодій і квантовими флюктуаціями. Цікаво зазначити, що для деякого спеціального набору констант обмінних взаємодій у таких системах з'являється бездисперсійна (плоска) одномагнетонна зона з найнижчою енергією (ідеальна фрустрація і достатньо велика взаємодія у димерах).

З іншого боку, фрустровані двошарові ґратки можуть належати до так званих спінових систем із локалізованими магнетонами [J. Schulenburg, et al. Phys. Rev. Lett., 2002, **88**, 167207], яким властива своєрідна низькотемпературна термодинаміка в околі поля насичення. Зокрема, стрибок намагніченості при полі насичення в основному стані, скінченна залишкова ентропія при полі насичення, додатковий низькотемпературний пік у температурній залежності теплоємності в околі поля насичення, тощо [J. Richter, Low Temp. Phys., 2005, **31**, 695; O. Derzhko, et al. Low Temp. Phys., 2007, **33**, 745; O. Derzhko, et al. Int. J. Mod. Phys. B., 2015, **29**, 1530007]. Синглетний стан димера — це стан, який відповідає локалізованому магнетону й належить повністю бездисперсійній (плоскій) одномагнетонній зоні. Впродовж останнього десятиліття було виявлено велике різноманіття плоскостонних систем із незвичайними фізичними властивостями. Зокрема, плоскостонний ферромагнетизм Мільке-Тасакі в одноорбітальній моделі Габарда [A. Mielke, J. Phys. A: Math. Gen., 1991, **24**, L73; H. Tasaki, Phys. Rev. Lett., 1992, **69**, 1608; A. Mielke, et al. Commun. Math. Phys., 1993, **158**, 341; див. також [D. Leykam, et al. Phys. Rev. B., 2013, **88**, 224203; S. Flach, et al. Europhys. Lett., 2014, **105**, p1; W. Maimaiti, et al. Phys. Rev. B., 2017, **95**, 115135; L. Morales-Inostroza, et al. Phys. Rev. A., 2016, **94**, 043831]. Локальна природа одномагнетонних станів у плоскостонних системах дозволяє побудувати багатоманітні локалізовані стани та обчислити кратність їхнього виродження, здійснюючи відображення вихідної системи на класичний ґратковий газ жорстких об'єктів. Випадок двошарових ґраток у

такій перспективі обговорювався в [J. Richter, et al. Phys. Rev. B., 2006, **74**, 144430; O. Derzhko, et al. Phys. Rev. B., 2010, **82**, 214412; O. Derzhko, et al. Theor. Math. Phys., 2011, **168**, 1236]. У режимі сильних полів та низьких температур незалежні локалізовані магнони мають найнижчу енергію, і тому вони домінують у низькотемпературній термодинаміці.

Актуальність теми дисертаційної роботи визначається інтересом до плоскостових систем за наявності сильних кореляцій і, зокрема, до фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга на двошарах. Розглянуті у дисертації моделі дозволяють детальне дослідження ефектів фрустрації в квантових спінових моделях. Наявність фрустрації приводить до локалізованих одностинкових станів і дозволяє побудувати багаточастинкові стани, а тому дослідити фізичні властивості в термінах нетривіальних класичних моделей статистичної механіки. Також двошарові спінові моделі недавно використовувалися для випробування нових алгоритмів квантового Монте Карло, які застосовні в режимі повної фрустрації. Аналітичні розрахунки потрібні тут для перевірки нових числових методів. Двошарові моделі дозволяють пояснити результати експериментальних досліджень для магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [H. Tanaka, et al. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, **83**, 103701]. Квантові спінові моделі Гайзенберга на двошарових ґратках передбачають існування фазових переходів у сильних магнітних полях, пов'язаних із впорядкуванням локалізованих магнів.

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

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

- вивчити властивості парамагнетика Тасакі-Габарда; порівняти їх із звичайним парамагнетиком Кюрі;
- варіаційним методом проаналізувати фазові діаграми основного стану спін-1/2 антиферромагнітної моделі Гайзенберга на двошарових ґратках;
- розробити ефективний опис низькотемпературних властивостей спін-1/2 фрустрованої антиферромагнітної моделі Гайзенберга на квадратній двошаровій ґратці для пояснення експериментів над сполукою $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$; побудувати фазову діаграму “магнітне поле – температура”; запропонувати нові експерименти для виявлення фазового переходу Ізинга-Онзагера;
- вивчити низькотемпературні властивості спін-1/2 антиферромагнітної моделі

Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі; побудувати ефективний опис низькотемпературних властивостей вихідної моделі у полях поблизу поля насичення; отримати фазову діаграму “магнітне поле – температура”;

- дослідити низькотемпературні термодинамічні властивості квантової моделі Гайзенберга на фрустрованій трикутній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі; проаналізувати вплив знаку міждиммерних взаємодій на властивості моделі; побудувати фазові діаграми “магнітне поле – температура”; виявити зв'язок між вихідною моделлю і моделлю жорстких шестикутників Бекстера та моделлю ґраткового газу зі скінченим відштовхуванням на трикутній ґратці.

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

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

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

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

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

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

Пояснено експериментальні дані, отримані для сполуки $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$. Запропоновано провести нові низькотемпературні вимірювання теплоємності для експериментального виявлення фазового переходу Ізинга-Онзагера.

Можна вказати на кілька головних аспектів **практичного і наукового значення одержаних результатів**. Запропонований підхід ефективного опису можна використати для пояснення проведених експериментів і пропозиції нових експери-

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

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи доктор фізико-математичних наук О. В. Держко. В публікаціях [1–6] автору дисертації належить:

- аналіз властивостей парамагнетика Тасакі-Габарда в нехтовно малому магнітному полі [1];
- варіаційний аналіз і порівняння з недавніми дослідженнями фазових діаграм основного стану для квадратної та шестикутної двошарових ґраток [6];
- отримання одномагнетного спектру для шестикутної та трикутної двошарових ґраток [2, 5];
- аналіз просторових конфігурацій жорстких об'єктів на допоміжних ґратках та побудова багатомантних станів [2, 5];
- аналітичне виведення ефективних гамільтоніанів із допомогою операторної теорії збурень у випадку квадратної, шестикутної та трикутної двошарових ґраток [2, 4, 5];
- числовий аналіз ефективних моделей методами точної діагоналізації, квантового і класичного Монте Карло для систем невеликих розмірів [2–5];
- отримання фазових діаграм, які відображають переходи лад-безлад, для квадратної, шестикутної та трикутної двошарових ґраток [2, 4, 5].

Обговорення та інтерпретацію отриманих результатів в статтях [1–6] співавтори виконували разом.

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

Результати, викладені в дисертації, **опубліковано** в п'яти статтях [1–5], одному препринті [6], а також в тезах чотирьох конференцій [7–10].

Структура та об'єм дисертації. Дисертація складається зі вступу, розділу з оглядом літератури та чотирьох основних розділів, у яких викладені результати досліджень дисертанта, а також висновків, списку використаних джерел та двох додат-

ків. Робота викладена на 132 сторінках (разом із літературою та додатками – 147 сторінок), бібліографічний список містить 120 найменувань публікацій у вітчизняних та закордонних виданнях.

ЗМІСТ РОБОТИ

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

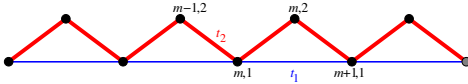


Рис. 1: Одновимірніа гратка Тасакі. Тут $t_2 = \sqrt{2}t_1 > 0$.

У **першому розділі** проведено огляд літератури, що стосується даної роботи. В першій частині цього розділу обговорено фрустрацію взаємодій, умови появи бездисперсійних зон та до чо-

го приводить наявність локалізованих одночастинкових станів у системах із сильними кореляціями. В другій частині першого розділу, як ілюстративний приклад, досліджено властивості одновимірного парамагнетика Тасакі-Габарда в нехтовно малому магнітному полі. Для цього розглянуто стандартну одноорбітальну модель Габарда з гамільтоніаном

$$H = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} H_{0,\sigma} + H_U, \quad H_{0,\sigma} = \sum_{(ij)} t_{ij} (c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma}), \quad t_{ij} > 0, \quad H_U = U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow}, \quad U > 0, \quad (1)$$

задану на пилкоподібному ланцюжку із спеціальним співвідношенням між інтегралами перестрибування вздовж прямої лінії t_1 і вздовж зигзаг шляху t_2 : $t_2 = \sqrt{2}t_1 > 0$ (див. рис. 1). За такої умови в одноелектронному спектрі з'являється плоска зона з найнижчою енергією. Добре відомо [H. Tasaki, Phys. Rev. Lett., 1992, **69**, 1608], що основним станом цієї моделі є повністю поляризований (насичений) феромагнітний стан, тобто $\langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,N} = (n/2)[(n/2) + 1]$, якщо число електронів n дорівнює $\mathcal{N} = N/2$ або $\mathcal{N} - 1$. Для менших чисел електронів, $1 < n < \mathcal{N} - 1$, маємо $0 < \langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,N} < (n/2)[(n/2) + 1]$ (ненасичений феромагнетизм). Більше того, $\lim_{N \rightarrow \infty} \langle \mathbf{S}^2 \rangle_{n,N} / n^2 = 0$, якщо $n/N < 1/2$. Іншими словами, термодинамічно великі системи проявляють феромагнетизм в основному стані лише для $n/N = 1/2$, але є парамагнітними для $0 < n/N < 1/2$. У цій частині першого розділу з'ясовано властивості парамагнетика Тасакі-Габарда.

Для цього зроблено відображення основних станів $n < \mathcal{N}$ електронів N -вузлового ланцюжка Тасакі на просторові конфігурації n жорстких димерів на $2N$ -вузловому простому ланцюжку. Звідки кратність виродження основного стану $g_N(n)$:

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

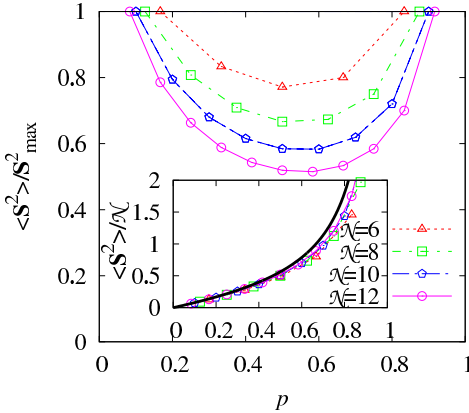


Рис. 2: Головна панель: залежність усередненого (за основними станами) квадрата повного спіну $\langle S^2 \rangle_{n,N}$ (пронормованого на його максимальне значення $(n/2)[(n/2) + 1]$) від густини електронів p . Вставка: залежність усередненого (за основними станами) квадрата повного спіну $\langle S^2 \rangle_{n,N}$ (на комірку) від густини електронів p . Товста чорна крива відповідає результату при $\mathcal{N} \rightarrow \infty$.

Кюрі, присутня ненульова залишкова ентропія, пов'язана з сильним виродженням основного стану. $1/\mathcal{N}$ скейлінг свідчить, що залишкова ентропія залишається і в термодинамічно великих системах. Теплоємність при ненульовому полі h показує нетривіальну залежність від температури (додатковий низькотемпературний пік). Із ростом p , відхилення від випадку парамагнетика Кюрі стає більш виразним (пік стає нижчим і ширшим) і низькотемпературна частина $C(T, h, n, \mathcal{N}) \rightarrow 0$, коли $p \rightarrow 1$. Низькотемпературні криві намагніченості показують, що парамагнетик Тасакі-Габарда з $p > 0$ легше намагнітити, а ніж парамагнетик Кюрі. На рисунку 2 показано результати для $\langle S^2 \rangle_{n,N}$, які демонструють, що: 1) феромагнетизм зникає для $0 < p < 1$, коли \mathcal{N} зростає (головна панель) і 2) $\langle S^2 \rangle_{n,N} / \mathcal{N}$ прямує до $3p(2-p)/[8(1-p)]$ (товста чорна крива) [M. Maksymenko, et al. Phys. Rev. Lett., 2012, 109, 096404], коли \mathcal{N} зростає (вставка).

В третій частині першого розділу проведено аналіз низки праць, в яких досліджувалися двошарові спінові ґратки як теоретично, так і експериментально (реальні магнітні сполуки). Сформульовано задачі, які будуть розв'язані в даній дисертаційній роботі.

Другий розділ дисертації стосується квантової моделі Гайзенберга з гамільтоні-

Канонічна статистична сума n електронів на ланцюжку Тасакі з об'ємом $\mathcal{N} = N/2$ комірок є $Z(T, n, \mathcal{N}) = g_{\mathcal{N}}(n)e^{-n\varepsilon_1/T}$. Формула (2) дозволяє обчислити вклад множини сильно вироджених основних станів у термодинаміку розглянутої моделі Габарда. Цей вклад домінує для $0 \leq p = n/\mathcal{N} \leq 1$ у низькотемпературному режимі.

Далі, розглянуто випадок присутності нехтовно малого зовнішнього магнітного поля $h > 0$. Ми цікавилися випадком $1 \leq n < \mathcal{N} - 1$, в якому проявляється парамагнетизм у термодинамічній границі $n \rightarrow \infty, \mathcal{N} \rightarrow \infty, 0 < p < 1$. Нагадаємо, що вільна енергія для спін-1/2 парамагнетика Кюрі

$$f_C(T, h) = -T \ln \left(2 \cosh \frac{h}{2T} \right). \quad (3)$$

Обчислення за наявності магнітного поля для $\mathcal{N} = 6, 8, 10, 12$ показали, що в парамагнетику Тасакі-Габарда, на відміну від звичайного парамагнетика

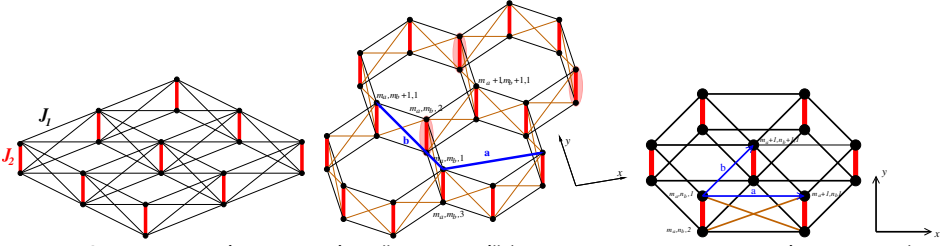


Рис. 3: Двошарові ґратки різної геометрії (квадратна, шестикутна і трикутна).

аном

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j, \quad (4)$$

заданої на двошарі. Ламані дужки означають суму за всіма зв'язками на двошаровій ґратці (див. рис. 3). Антиферромагнітні константи зв'язку $J_{ij} > 0$ набувають трьох значень: J_2 (димерні міжшарові зв'язки між найближчими сусідами), J_1 (внутрішньшарові зв'язки між найближчими сусідами) і J_X (міжшарові зв'язки між наступними найближчими сусідами), див. рис. 3. Відповідно до співвідношень між величинами зв'язків J_2 , J_1 і J_X , можна розглянути дві різні області з відповідними пробними варіаційними хвильовими функціями: $J_1 \gg J_X$ (або $J_1 \ll J_X$) і $J_1 \approx J_X$ у режимі сильних і слабких J_2 .

Нехай у нас є квадратний двошар (див. рис. 3). В області, коли $J_1 \gg J_X$ (чи $J_1 \ll J_X$) варіаційний стан вибираємо в такому вигляді:

$$|\Psi_{\text{var}}\rangle = \text{П.v.b.} \frac{1}{\sqrt{1 + \alpha^2}} (|\uparrow_{m,n,1} \downarrow_{m,n,2}\rangle - \alpha |\downarrow_{m,n,1} \uparrow_{m,n,2}\rangle)_{\text{v.b.}}, \quad (5)$$

де m і n позначають вузли на квадратній ґратці, а числа 1 і 2 позначають номер шару; $0 \leq \alpha \leq 1$ — варіаційний параметр, який буде знайдено з мінімуму варіаційної енергії $E(\alpha) = \langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle$. Граничний випадок $\alpha = 0$ (режим слабких J_2) відповідає стану Нееля, а інший випадок $\alpha = 1$ (режим сильних J_2) відповідає кристалу з синглетних станів на димерних зв'язках. Далі обчислюємо варіаційну енергію на один димер $E(\alpha)/N$. Після її мінімізації одержуємо енергію основного стану на один димер:

$$\frac{E_0}{N} = \begin{cases} \frac{J_2}{4} + (J_1 - J_X) \left(1 - \frac{J_2}{4(J_1 - J_X)}\right)^2, & J_2 \leq 4(J_1 - J_X), \\ -\frac{3J_2}{4}, & J_2 \geq 4(J_1 - J_X). \end{cases} \quad (6)$$

Порівняння цих енергій дає межі існування димер-синглетної фази (DS) та фаз Нееля (N_1 , N_2).

Далі, розглядаємо область, коли $J_1 \approx J_X$. В такому випадку варіаційну хвильову

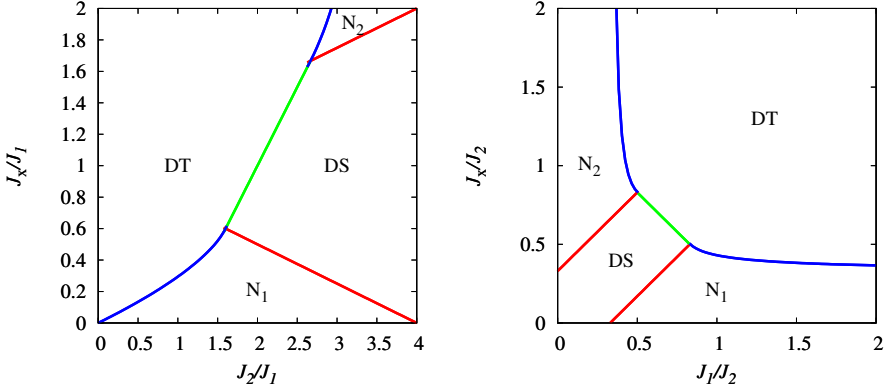


Рис. 4: Фазова діаграма основного стану для квадратної двошарової ґратки в координатах J_2/J_1 – J_x/J_1 (ліва панель) і для шестикутної двошарової ґратки в координатах J_1/J_2 – J_x/J_2 (права панель).

функцію вибираємо в формі:

$$|\Psi_{\text{var}}\rangle = \Pi_{\text{v.b.}} \left[\frac{\beta}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) + \sqrt{1 - \beta^2} \left(\frac{1 + (-1)^{m+n}}{2} |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle + \frac{1 - (-1)^{m+n}}{2} |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle \right) \right]_{\text{v.b.}}, \quad (7)$$

де $m + n$ може бути або парним (одна підґратка), або непарним (інша підґратка); $0 \leq \beta \leq 1$ — варіаційний параметр, який знаходиться з мінімуму варіаційної енергії $E(\beta) = \langle \Psi_{\text{var}} | H | \Psi_{\text{var}} \rangle$. Граничний випадок $\beta = 0$ (режим слабких J_2) відповідає триплетному стану на кожному димерному зв'язку, а інший випадок $\beta = 1$ (режим сильних J_2) відповідає кристалу з синглетних станів на димерних зв'язках. Енергія основного стану розрахована на один димер (після мінімізації відносно β) матиме вигляд:

$$\frac{E_0}{N} = \begin{cases} \frac{J_2}{4} - (J_1 + J_x), & J_2 \leq J_1 + J_x, \\ -\frac{3J_2}{4}, & J_2 \geq J_1 + J_x. \end{cases} \quad (8)$$

Щоб отримати повну фазову діаграму для квадратної двошарової ґратки, потрібно також порівняти енергії з різних областей для фаз Нееля (N_1 , N_2) та димер-триплетної фази (DT).

Фазова діаграма зображена на рисунку 4 (ліва панель) може бути порівняна з результатами, одержаними в роботі [J. Starmanns, et al. Phys. Rev. Lett., 2018, **121**, 127201] методом обчислень за допомогою тензорних мереж та квантового Монте Карло. Для $J_x = 0$ (нефрустрована квадратна двошарова ґратка) перехід між фазами DS і N_1 відбувається при $J_2/J_1 = 4$ (див. рис. 4, ліва панель). В роботі [J. Starmanns,

et al. Phys. Rev. Lett., 2018, **121**, 127201] це відношення дорівнює значенню 2.5220(1). У випадку $J_X = J_1$ (повністю фрустрована квадратна двошарова ґратка) перехід між фазами DS і DT відбувається при $J_2/J_1 = 2$ (див. рис. 4, ліва панель). У роботі [J. Starmanns, et al. Phys. Rev. Lett., 2018, **121**, 127201] це відношення рівне значенню 2.3279(1). Також можна порівняти координати однієї з двох потрійних точок, у яких перетинаються три криві фазових переходів (див. рис. 4, ліва панель). Точка, в якій сходяться DS , N_1 і DT фази визначається координатами: $J_2 = 1.6J_1$ і $J_X = 0.6J_1$. В [J. Starmanns, et al. Phys. Rev. Lett., 2018, **121**, 127201] ця точка представлена координатами: $J_2 = 1.638(15)J_1$ і $J_X = 0.520(5)J_1$.

Для шестикутної двошарової ґратки (див. рис. 3), виконавши такі ж обчислення, отримуємо подібні вирази для варіаційної енергії та фазову діаграму (див. рис. 4, права панель). Цю фазову діаграму можна порівняти з фазовою діаграмою отриманою в роботі [H. Zhang, et al. Phys. Rev. B., 2016, **93**, 235150] за допомогою різних методів. Для критичної точки на лінії повної фрустрації $J_X = J_1$ у [H. Zhang, et al. Phys. Rev. B., 2016, **93**, 235150] маємо: $(J_1/J_2)_c^{SB-MFT} = 0.547$ і $(J_1/J_2)_c^{LSWT} = 0.551$. Наші обчислення дають таке передбачення: $(J_1/J_2)_c = 2/3 \approx 0.667$.

У **третьому розділі** розглянуто анізотропну спін-1/2 XXZ антиферромагнітну квадратну двошарову ґратку з $N = 2N$ вузлами (див. рис. 3). Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta_{ij} s_i^z s_j^z) - \sum_{i=1}^N \mathbf{h} \cdot \mathbf{s}_i. \quad (9)$$

Тут J_{ij} і Δ_{ij} набувають або значень J_2 і Δ_2 (вертикальні димерні зв'язки), або J_1 і Δ_1 (міждимерні зв'язки). Відповідно до [H. Tanaka, et al. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, **83** 103701], розглянуто дві різні орієнтації магнітного поля $\mathbf{h} = (0, 0, h^z)$ і $\mathbf{h} = (h^x, 0, 0)$, а також два різні g -фактори $g^z = 2.0$ і $g^x = 3.86$, тобто, $h^z = g^z \mu_B H$ і $h^x = g^x \mu_B H$, де $\mu_B \approx 0.67171$ К/Т є магнетон Бора і H є значення (виміряне в теслах) прикладеного магнітного поля.

Розроблено ефективну низькотемпературну теорію для моделі (9) у сильних магнітних полях, застосовуючи підхід сильного зв'язку і теорію збурень. Для цього зроблено припущення, що основна частина гамільтоніана H_{main} складається тільки з вертикальних зв'язків J_2 і доданка Зеемана при магнітному полі h_0 , при якому два власні стани $|u\rangle$ і $|d\rangle$ спінового димера є виродженими. Доданки, що залишилися в (9), розглядаються як збурення $V = H - H_{\text{main}}$. Ефективний гамільтоніан отримується за допомогою операторної теорії збурення:

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\phi_\alpha\rangle \langle \phi_\alpha|}{\epsilon_0 - \epsilon_\alpha} VP, \quad (10)$$

де $|\phi_\alpha\rangle$, $\alpha \neq 0$ — збуджені стани гамільтоніана H_{main} , а $P = |\varphi_0\rangle \langle \varphi_0|$ — проєктор на множину основних станів H_{main} . Введемо також псевдоспінові оператори $T^z = (|u\rangle \langle u| - |d\rangle \langle d|)/2$, $T^+ = |u\rangle \langle d|$, $T^- = |d\rangle \langle u|$ на кожному вертикальному димерному

зв'язку. В результаті обчислень прийдемо до такого ефективного гамільтоніана:

$$H_{\text{eff}} = C - h \sum_{m=1}^N T_m^z + J \sum_{\langle mn \rangle} T_m^z T_n^z. \quad (11)$$

Така форма гамільтоніана відповідає спін-1/2 антиферромагнітній моделі Ізинга на квадратній ґратці. Параметри C , h і J є функціями параметрів гамільтоніана J_2 , Δ_2 , J_1 , Δ_1 і h .

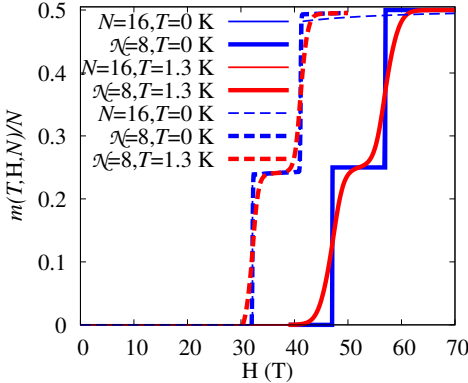


Рис. 5: Криві намагніченості для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ ($J_2 = 110$ K, $\Delta_2 = 0.149$, $4J_1 = 23.7$ K, $\Delta_1 = 0.56$). Дані точної діагоналізації для початкової моделі ($N = 16$, тонкі лінії) порівняні з відповідними даними для ефективного моделі ($N = 8$, товсті лінії). Суцільні лінії представляють дані для $\mathbf{h} = (0, 0, h^z)$, а штрихові лінії для $\mathbf{h} = (h^x, 0, 0)$.

при $H = 47.5$ T вздовж осі z для ефективного моделі з ($N = 8$ і 16) та для початкової моделі з ($N = 16$) і дані обчислень методом класичного Монте Карло для ефективного моделі з $N = \mathcal{L}^2$ вузлів із \mathcal{L} аж до 256. Логарифмічна сингулярність при $T_c \approx 0.46$ K (для $H = 47.5$ T) з'являється для достатньо великих розмірів системи. Цей рисунок також показує, що дані для ефективного та повної початкової моделей при $N = 8$ збігаються аж до $T \approx 10$ K [штрихова з заповненими кружечками (сіра) ($N = 8$) і тонка штрихова ($N = 16$) лінії на рисунку 6], тобто, далеко за межами $T_c \approx 0.46$ K. Це свідчить про надійність зробленого передбачення про фазовий перехід при $T \approx 0.46$ K у термодинамічно великій системі. Подібна поведінка $c(T)$ виявлена для поля, прикладеного вздовж осі x . Таким чином, відповідні вимірювання для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ є надзвичайно бажаними для підтвердження цих передбачень.

На рисунку 5 представлені результати точної діагоналізації для кривих намагніченості для сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ для обох напрямків магнітного поля. Стрибки намагніченості на рисунку 5 відбуваються при критичних значеннях полів $H_c \approx 47.04$ T і $H_{\text{sat}} \approx 56.94$ T, якщо поле прикладено вздовж осі z , та при $H_c \approx 32.16$ T і $H_{\text{sat}} \approx 41.14$ T, якщо поле прикладено вздовж осі x . Ці значення добре узгоджуються з відповідними експериментальними даними (див. рис. 3 у [Н. Tanaka, et al. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, **83** 103701]): $H_c = 46.8$ T, $H_{\text{sat}} = 56.7$ T і $H_c = 32.0$ T, $H_{\text{sat}} = 41.0$ T. Отже, розроблений теоретичний підхід забезпечує добрий опис процесу намагнічування сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ не тільки у сильних магнітних полях, а й у всьому інтервалі полів.

На рисунку 6 показано дані точної діагоналізації для теплоємності $c(T)$

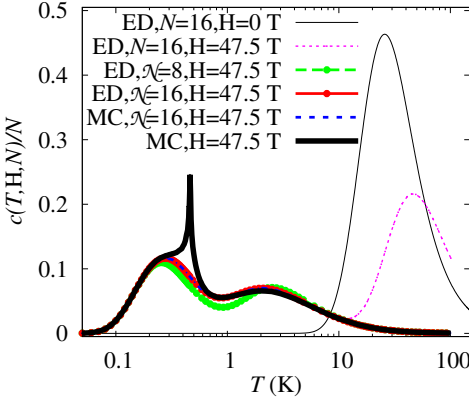


Рис. 6: Дані точної діагоналізації та класичного Монте Карло для температурної залежності теплоємності для модельних параметрів $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ вздовж осі z .

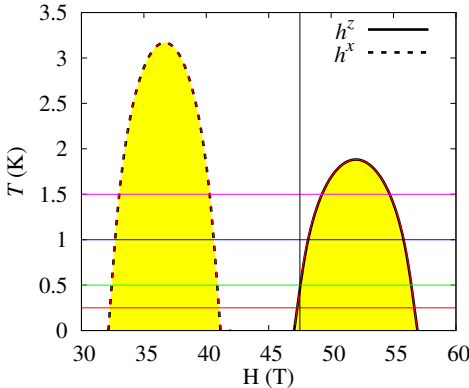


Рис. 7: Теоретично передбачена фазова діаграма для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у площині “магнітне поле – температура”.

зможу розглядати підпростори з різними значеннями S^z окремо.

Розгляньмо випадок $J_x = J_1$. Через локалізований характер найнижчих одномантонних станів можна збудувати багатомантонні основні стани у просторах з $S^z < N/2 - 1$. Щоб залишатися в множині основних станів, потрібно дотримуватися обмеження, яке накладає правило жорстких об’єктів. А саме, сусідні вертикальні димери не можуть бути заселеними одночасно, так як це призведе до зростання

Основним результатом є фазова діаграма для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у площині “магнітне поле – температура” (див. рис. 7). Із цієї фазової діаграми можна зробити висновок, що, прикладаючи поле $H > 32.16 \text{ T}$ ($H > 47.04 \text{ T}$) вздовж осі x (вздовж осі z) до сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$, будемо спостерігати впорядкування локалізованих магніонів (кристал з локалізованих магніонів), а відповідний фазовий перехід належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. Цей фазовий перехід можна виявити за допомогою вимірювання теплоємності c , яка має виявляти логарифмічну сингулярність у своїй температурній залежності при $T_{\text{trans}}(H)$ чи у своїй залежності від магнітного поля при $H_{\text{trans}}(T)$.

В **четвертому розділі** розглянуто спін-1/2 антиферромагнітну модель Гайзенберга з гамільтоніаном

$$H = \sum_{\langle ij \rangle} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \\ J_{ij} > 0, \quad S^z = \sum_i s_i^z \quad (12)$$

на шестикутній двошаровій ґратці, яка складається з $N = 2N$ вузлів (див. рис. 3). J_{ij} набуває трьох різних значень: J_2 (димерні зв’язки), J_1 (зв’язки найближчих сусідів у окремому шарі) і J_x (фрустровані зв’язки між шарами) (див. рис. 3). Важливо відзначити, що z компонента повного спіну S^z комутує з гамільтоніаном системи H (12). Це дає

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

Найцікавішим наслідком відповідності між фрустрованою квантовою двошаровою ґраткою і ґратковим газом жорстких об'єктів є існування фазового переходу лад-безлад. Загальновідомо, що для моделі ґраткового газу на шестикутній ґратці з виключенням перших сусідів, жорсткі шестикутники спонтанно заселяють одну з двох підґраток шестикутної ґратки, коли активність z досягає критичного значення $z_c = 7.92 \dots$ [R. Baxter, Ann. Comb., 1999, 3, 191]. На мові вихідної фрустрованої квантової спінової моделі, це відповідає впорядкуванню локалізованих магнінів, коли їхня густина зростає. Це відбувається при низьких температурах нижче поля насичення. Оскільки $\ln z_c = (h_{\text{sat}} - h)/T_c$, то для фіксованого (малого) відхилення від поля насичення $h_{\text{sat}} - h$ формула для критичної температури T_c визначається так:

$$T_c = \frac{h_{\text{sat}} - h}{\ln z_c} \approx \frac{h_{\text{sat}} - h}{\ln 7.92} \approx 0.48 (h_{\text{sat}} - h). \quad (13)$$

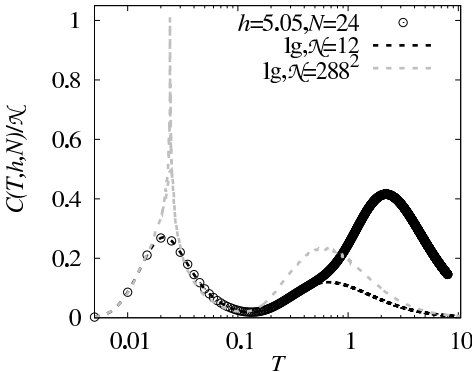


Рис. 8: Поле $h = 5.05$, $J_2 = 5$, $J_1 = 1$. На рисунку дані точної діагоналізації для ґратки з $N = 24$ вузлами представлені кільцями, а передбачення моделі ґраткового газу штриховою товстою лінією.

Взаємодія у (14) описує збільшення енергії на V , якщо два сусідні вузли заселені шестикутниками. В границі $V \rightarrow \infty$ правило жорстких шестикутників відновлюється.

На рисунку 8 представлені дані симуляцій методом класичного Монте Карло для $h = 5.05$ [модель ґраткового газу (14)], які показують як змінюється температурна

Виходячи з праць [A. Honecker, et al. Eur. Phys. J. B., 2000, 15, 227; O. Derzhko, et al. Phys. Rev. B., 2010, 82, 214412], крім станів незалежних локалізованих магнінів, можна також взяти до уваги вклад у статистичну суму й від інших локалізованих магнінів, які відповідають перекриванню шестикутників (порушують правило жорстких шестикутників). Відповідний гамільтоніан ґраткового газу має таку форму:

$$\mathcal{H}(\{n_m\}) = -\mu \sum_{m=1}^N n_m + V \sum_{\langle mn \rangle} n_m n_n. \quad (14)$$

Тут $n_m = 0, 1$ — число заповнення на вузлі m ($m = 1, \dots, N$) допоміжної шестикутної ґратки, $\mu = h_{\text{sat}} - h$, $V = J_1$.

залежність $C(T, h, N)/N$ і розвивається логарифмічна сингулярність при $T_c \approx 0.02$ із збільшенням розміру системи (див. $C(T, h, N)/N$ для $N = 288^2$ на рисунку 8).

Для антиферромагнітної моделі Ізинга на шестикутній ґратці в однорідному магнітному полі [див. (14)] відомо декілька виразів для критичної лінії в площині “магнітне поле – температура”, які є в хорошій згоді з числовими результатами, див., наприклад, [X.-Z. Wang, et al. Phys. Rev. Lett., 1997, **78**, 413; F. Wu, et al. Phys. Rev. Lett., 1989, **62**, 2773; F. Wu, et al. Phys. Rev. Lett., 1989, **63**, 696; X.-Z. Wang, et al. Phys. Rev. E., 1997, **56**, 2793]. На основі цих виразів можна побудувати фазову діаграму для фрустрованого квантового антиферромагнетика Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці (див. рис. 9).

Коли умови плоскостності трохи порушені, й колишня плоска зона набуває малої дисперсії, то ефективний опис можна збудувати, виходячи з наближення сильного зв'язку і теорії збурень:

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N} \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3J}{8} \right) - h \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \sum_{\langle mn \rangle} \left[J^z T_m^z T_n^z + J (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) \right],$$

$$h = h - J_2 - \frac{3J}{2}, \quad J = \frac{J_1 + J_x}{2}, \quad J^z = J, \quad J = J_1 - J_x. \quad (15)$$

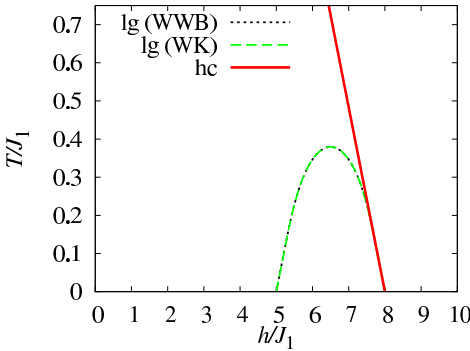


Рис. 9: Фазова діаграма фрустрованого спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на шестикутній двошаровій ґратці у площині “магнітне поле – температура” ($J_2/J_1 = 5$). Координати найвищої точки купола: $h/J_1 = J_2/J_1 + 3/2$ і $T_c/J_1 = 1/[2 \ln(2 + \sqrt{3})] \approx 0.380$. Купол торкається горизонтальної осі в точках $h_2/J_1 = J_2/J_1$ і $h_{\text{sat}}/J_1 = J_2/J_1 + 3$.

Аналіз на основі рівняння (15) показує, що стрибки намагніченості “виживають” навіть для досить значних відхилень від випадку ідеальної фрустрації. Це спін-флоп перехід, який присутній у двовимірному ізингоподібному XXZ антиферромагнетика Гайзенберга в зовнішньому полі вздовж осі легкого намагнічення [S. Yunoki, Phys. Rev. B., 2002, **65**, 092402; M. Holtschneider, et al. Phys. Rev. B., 2007, **75**, 224417; K. Balamurugan, et al. Phys. Rev. B., 2014, **90**, 104412].

На рисунку 10 (ліва панель) показана поведінка намагніченості, яка характерна для спін-флоп переходу, який відбувається при деякому критичному магнітному полі h_c , де h_c є трохи більшим за 7.8 для розглядуваного набору параметрів. На правій панелі представлена температурна залежність теплоємності $C(T)$. Цікаво порівняти криві $C(T)$ для $h = 7.7$ і $h = 8.0$ (див. рис. 10). В той час як перша крива відображає перехід із антиферромагнітної фази до парамагнітної, друга крива відображає перехід із спін-флоп фази до парамагнітної [М.

Holtschneider, et al. Phys. Rev. B., 2007, 75, 224417]. Помітні ефекти скінченних розмірів для $h = 7.7$ (великі порожні кружечки відповідають $N = 256$, тоді як малі заповнені кружечки відповідають $N = 1\,024$) вказують на сингулярність, яка з'являється в термодинамічній границі. І навпаки, керований температурою перехід між спін-флоп фазою та парамагнітною фазою не супроводжується сингулярністю в теплоємності. Очікується, що ці сліди спін-флоп фази можна побачити в початковій моделі (12) в розглядуваному діапазоні параметрів.

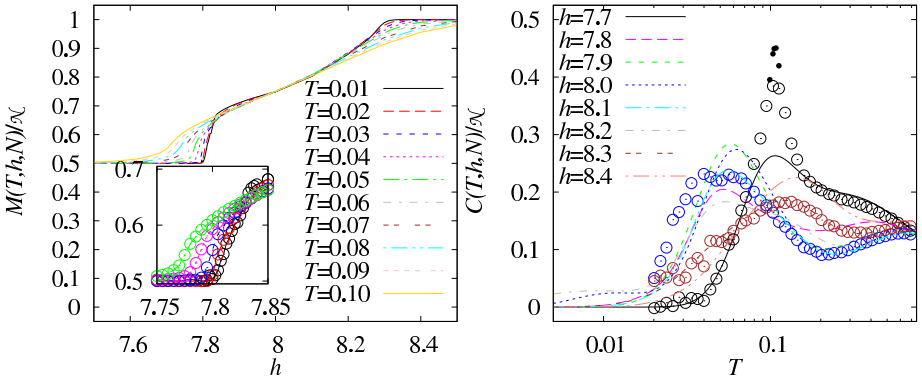


Рис. 10: Криві намагніченості при різних температурах (ліва панель) і температурні залежності теплоємності при різних полях (права панель) для (12) з $J_2 = 5$, $J_1 = 1.1$ і $J_X = 0.9$, як впливає з симуляції методом квантового Монте Карло (N до 2 304 для лівої панелі і N до 1 024, кружечки на правій панелі) і точної діагоналізації ($N = 18$, суцільні лінії на правій панелі) для ефективної моделі (15).

У **п'ятому розділі** розглянуто квантову спінову модель Гайзенберга з гамільтоніаном (12), але на трикутній двошаровій ґратці, яка складається з $N = 2N$ вузлів. J_{ij} набуває трьох різних значень: $J_2 > 0$ (димерні зв'язки), J_1 (зв'язки найближчих сусідів у окремому шарі) і J_X (фрустровані зв'язки між шарами) (див. рис. 3). Важливий випадок ідеальної фрустрації, коли константи обмінної взаємодії $J_1 = J_X$. При цьому константи $J_1 = J_X$ можуть бути як додатними (антиферомагнітний випадок для міждимерних взаємодій), так і від'ємними (феромагнітний випадок для міждимерних взаємодій).

До цієї моделі застосовано методи та процедури, які викладені в третьому та четвертому розділах. Отримано вирази для одномагнетонного спектру та знайдено умови, коли можна застосовувати концепцію локалізованих магнітонів. Здійснено відображення локалізованих магнітонів на класичний газ жорстких шестикутників на трикутній ґратці (модель Бекстера). Таким чином, проілюстровано можливість застосування картини локалізованих магнітонів для обчислення термодинамічних характеристик трикутного двошару у режимі сильних магнітних полів та низьких температур.

В межах підходу сильного зв'язку та операторної теорії збурень побудовано ефе-

ктивний гамільтоніан для низькотемпературної поведінки моделі:

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N} \left[-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} + \frac{3}{8}(J_1 + J_X) \right] - \left[h - J_2 - \frac{3}{2}(J_1 + J_X) \right] \sum_m T_m^z + \sum_{\langle mn \rangle} \left[\frac{J_1 + J_X}{2} T_m^z T_n^z + (J_1 - J_X)(T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) \right]. \quad (16)$$

Ефективну теорію (16) використано для аналізу властивостей вихідної моделі. У випадку антиферромагнітних міждиммерних взаємодій крива намагніченості в залежності від магнітного поля має додаткові плато, які пояснюються різним впорядкуванням локалізованих магнонів. Для моделі з ферромагнітними міждиммерними взаємодіями крива намагніченості має тільки плато, що відповідає насиченню.

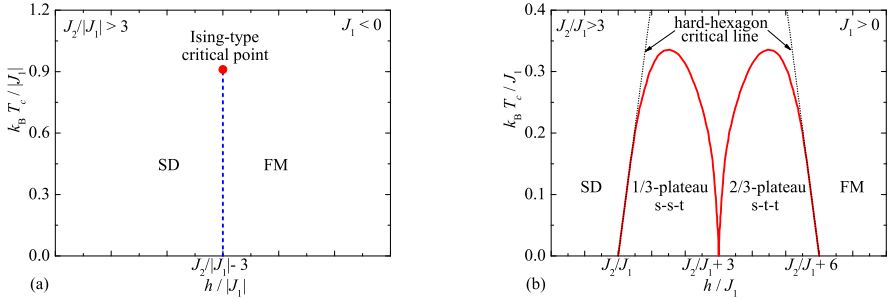


Рис. 11: Фазова діаграма для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в площині “магнітне поле-температура”, яка отримана з ефективної спин-1/2 моделі Ізинга на трикутній ґратці в випадку: (а) ферромагнітних міждиммерних взаємодій $J_1 < 0$; (б) антиферромагнітних міждиммерних взаємодій $J_1 > 0$. Штрихова лінія на панелі (а) вказує фазові переходи першого роду, які закінчуються в критичній точці фазового переходу другого роду з класу універсальності Ізинга. Суцільні лінії на панелі (б) вказують на фазові переходи другого роду.

Найцікавішими результатами є фазові діаграми в площині “магнітне поле-температура”, які отримані з ефективної моделі Ізинга на трикутній ґратці. Фазова діаграма для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в випадку ферромагнітних міждиммерних взаємодій $J_1 < 0$ представлена на рисунку 11 (а). Діаграма включає в себе лінію фазових переходів першого роду, що з’являється при критичному полі $h_c / |J_1| = J_2 / |J_1| - 3$. У спеціальній критичній точці стається фазовий перехід другого роду, який належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга, з координатами $(h_c / |J_1|; k_B T_c / |J_1|) = (J_2 / |J_1| - 3; 1 / \ln 3)$. Фазова діаграма для фрустрованої спин-1/2 моделі Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці в випадку антиферромагнітних міждиммерних взаємодій $J_1 > 0$ є симетричною щодо критичного поля $h_c / J_1 = J_2 / J_1 + 3$. З рисунка 11 (б) очевидно, що

критичні поля $h_c/J_1 = J_2/J_1$ і $h_c/J_1 = J_2/J_1 + 6$ при достатньо низьких температурах досягають критичних меж із моделі жорстких шестикутників на трикутній ґратці (пунктирні лінії), що свідчить про клас універсальності тристанової моделі Потса для цих двох конкретних фазових переходів.

Основні результати та висновки

1. Отримано низькотемпературні характеристики одновимірного парамагнетика Тасакі-Габарда в нехтовно малому зовнішньому магнітному полі. Показано, що такий парамагнетик, на відміну від звичайного парамагнетика Кюрі, має залишкову ентропію та швидше намагнічується. Показано, як зникає $\langle S^2 \rangle_{n,N}$ із ростом розмірів системи. Результати опубліковано в [1].
2. Запропоновано пробні варіаційні хвильові функції для опису станів квантової моделі Гайзенберга на двошарах при $T = 0$ за відсутності магнітного поля. Побудовано фазові діаграми основного стану квантового антиферомагнетика Гайзенберга на квадратному і шестикутному двошарах за відсутності магнітного поля. Показано, що простий підхід добре відтворює недавні результати, отримані значно складнішими методами. Результати опубліковано в [6].
3. На основі концепції локалізованих магнонів розроблено теорію квантового антиферомагнетика Гайзенберга на фрустрованій квадратній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі при низьких температурах для пояснення експериментальних даних, отриманих при вивченні сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у сильних магнітних полях [Н. Tanaka, et al. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, **83** 103701]. Передбачено наявність у системі фазового переходу, пов'язаного з впорядкуванням локалізованих магнонів. Ним можна керувати як за допомогою температури, так і за допомогою магнітного поля. Для виявлення фазового переходу на експерименті, запропоновано провести низькотемпературні вимірювання теплоємності для знаходження характерної логарифмічної сингулярності в температурному профілі теплоємності. Результати опубліковано в [4].
4. Розроблено систематичну теорію низькотемпературних властивостей спінів-1/2 антиферомагнетика Гайзенберга на фрустрованій шестикутній двошаровій ґратці в зовнішньому магнітному полі для сильних та помірних магнітних полів. Досліджено незвичайні властивості фрустрованої квантової спінової моделі: стрибки намагніченості та широке плато, залишкову ентропію в основному стані при полі насичення, додатковий низькотемпературний пік у температурній залежності теплоємності в околі поля насичення. Виявлено фазовий перехід лад-безлад при скінченній температурі, що належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинга. У випадку відхилень від ідеальної фрустрації, виявлено стрибки намагніченості, які можна пояснити як спін-флоп переходи в ефективній моделі. Дослідження може стосуватися магнітної сполуки $\text{V}_3\text{Mn}_4\text{O}_{12}(\text{NO}_3)$. Результати опубліковано в [2, 3].
5. Розроблено теорію низькотемпературних термодинамічних властивостей фрустрованого спінів-1/2 антиферомагнетика Гайзенберга на трикутній двошаровій ґратці. Виявлено, що феромагнітні міждимерні взаємодії при достатньо

низьких температурах приводять до фазового переходу першого роду, який, при зростанні температури, змінюється на фазовий перехід другого роду. Показано, що при нульовій температурі антиферромагнітні міждимерні взаємодії спричиняють послідовність із трьох фазових переходів першого роду. Ці переходи змінюються на чотири фазові переходи другого роду при достатньо малих, але ненульових температурах. Два фазові переходи другого роду, які пов'язані з руйнуванням синглет-димерної фази й початком утворення насиченого феромагнітного стану, належать до класу універсальності двовимірної тристанової моделі Потса. Два інші — зберігають цю властивість при вищих температурах, але є подібними до фазового переходу типу Костерліца-Таулеса при нижчих температурах. Результати опубліковано в [5].

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Baliha, V. One-Dimensional Tasaki-Hubbard Model in Paramagnetic Limit / V. Baliha, J. Richter, and O. Derzhko // *Acta Phys. Pol. A.* – 2017. – Vol. 132, no. 4. – Pp. 1256-1260.
2. Krokhmalskii, T. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field: Unconventional phase transitions in a two-dimensional isotropic Heisenberg model / T. Krokhmalskii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, and J. Richter // *Phys. Rev. B.* – 2017. – Vol. 95, no. 9. – Pp. 094419-1-11.
3. Krokhmalskii, T. Frustrated honeycomb-lattice bilayer quantum antiferromagnet in a magnetic field / T. Krokhmalskii, V. Baliha, O. Derzhko, J. Schulenburg, and J. Richter // *Physica B.* – 2018. – Vol. 536. – Pp. 388-391.
4. Richter, J. Thermodynamic properties of $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ in a strong magnetic field: Realization of flat-band physics in a highly frustrated quantum magnet / J. Richter, O. Krupnitska, V. Baliha, T. Krokhmalskii, and O. Derzhko // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 97, no. 2. – Pp. 024405-1-7.
5. Strečka, J. Ising versus Potts criticality in low-temperature magnetothermodynamics of a frustrated spin-1/2 Heisenberg triangular bilayer / J. Strečka, K. Karlová, V. Baliha, and O. Derzhko // *Phys. Rev. B.* – 2018. – Vol. 98, no. 17. – Pp. 174426-1-14.
6. Baliha, V. Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnets / V. Baliha, J. Richter, and O. Derzhko // *Lviv, 2018.* – (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-18-05E).
7. Баліга, В. Парамagnetик Тасакі-Габарда // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 9 – 10 червня, 2016 р. Збірка тез. – Львів: 2016. – С. 31.
8. Баліга, В. Квантовий антиферромагнетик на фрустрованому подвійному шарі з шестикутних ґраток у зовнішньому магнітному полі // XVII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 8 – 9 червня, 2017 р. Збірка тез. – Львів: 2017. – С. 23.
9. Баліга, В. Квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на двошарових ґратках. Варіаційний підхід // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 7 – 8

червня, 2018 р. Збірка тез. – Львів: 2018. – С. 36.

10. Baliha, V. Ground-state phases of frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnets // IX Conference of Young Scientists "Problems of Theoretical Physics", Kyiv, December 4–5, 2018. Book of Abstracts. – Kyiv: 2018. – P. 16.

АНОТАЦІЯ

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

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук (доктора філософії) за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104— Фізика та астрономія). — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2019.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню властивостей сильно скорельованих систем (ланцюжок Тасакі-Габарда і фрустровані квантові антиферромагнетики Гайзенберга), які при певних умовах мають бездисперсійну (плоску) зону в одночастинковому енергетичному спектрі. Моделі вивчаються при низьких температурах.

Розглянуто модель Тасакі-Габарда на пилкоподібному ланцюжку в нехтовно малому магнітному полі. Показано, чим властивості парамагнетика Тасакі-Габарда відрізняються від звичайного парамагнетика Кюрі.

Досліджено основний стан квантового антиферромагнетика Гайзенберга на двошарах. За допомогою варіаційного підходу побудовано фазові діаграми основного стану для квантових антиферромагнітних моделей Гайзенберга на квадратному та шестикутному двошарах.

Досліджено низькотемпературні властивості для квантових антиферромагнетиків Гайзенберга на фрустрованих двошарових ґратках (квадратна, шестикутна і трикутна). Показано існування фазових переходів з класів універсальності двовимірної моделі Ізинга та двовимірної тристанової моделі Потса. Розроблену теорію застосовано до сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$.

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

АННОТАЦИЯ

Балига В.Я. Эффекты фрустраций в квантовых антиферромагнетиках Гейзенберга на двухслойных решетках. — На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико - математических наук (доктора философии) по специальности 01.04.02 «Теоретическая физика» (104— Физика и астрономия). — Институт физики конденсированных систем НАН Украины, Львов, 2019.

Диссертационная работа посвящена исследованию свойств сильно скорельованных систем (цепочка Тасаки-Хаббарда и фрустрированные квантовые антиферромагнетики Гейзенберга), которые при определенных условиях имеют бездисперсионную (плоскую) зону в одночастичном энергетическом спектре. Модели изучаются при низких температурах.

Рассмотрено модель Тасаки-Хаббарда на пилообразной цепочке в пренебрежимо малом магнитном поле. Показано, чем свойства парамагнетика Тасаки-Хаббарда отличаются от обычного парамагнетика Кюри.

Исследовано основное состояние квантового антиферромагнетика Гейзенберга на двухслоях. С помощью вариационного подхода построены фазовые диаграммы основного состояния для квантовых антиферромагнитных моделей Гейзенберга на квадратном и шестиугольном двухслоях.

Исследовано низкотемпературные свойства для квантовых антиферромагнетиков Гейзенберга на фрустрированных двухслойных решетках (квадратная, шестиугольная и треугольная). Показано существование фазовых переходов из классов универсальности двумерной модели Изинга и двумерной модели Поттса с тремя состояниями. Разработанную теорию применено к соединению $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$.

Ключевые слова: квантовый антиферромагнетик Гейзенберга, двухслой, геометрическая фрустрация, бездисперсионная (плоская) зона, локализованные состояния, фазовый переход

ABSTRACT

Baliha V.Y. Effects of frustration in quantum Heisenberg antiferromagnets on bilayer lattices. — Manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Philosophy in Physics and Mathematics on the speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 — Physics and Astronomy). — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2019.

The thesis is devoted to investigation of the properties of strongly correlated systems (Tasaki-Hubbard chain and frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets), which under special conditions have a dispersionless (flat) band in the one-particle energy spectrum. The models are examined at low temperatures.

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

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

On the basis of an effective model, a theory for a magnetic compound $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$ in an external magnetic field for the description of its low-temperature properties is developed. The compound can be described as a quantum spin model on a square bilayer lattice. The results of experiments for this compound have been reproduced and new predictions have been made, which require new experimental studies to confirm them. The applicability of the developed theory based on the Heisenberg quantum model on a honeycomb bilayer lattice to the magnetic compound $Bi_3Mn_4O_{12}(NO_3)$ is also discussed.

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

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

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