

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова  
праця на правах рукопису

ГУТАК Тарас Ігорович

УДК 538.9, 546.3, 532.5, 004.94

## ДИСЕРТАЦІЯ

ТЕРМОДИНАМІКА ФРУСТРОВАНИХ КВАНТОВИХ СПІНОВИХ СИСТЕМ

104 — фізика та астрономія

10 — природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора філософії

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

\_\_\_\_\_ Т. І. Гутак

Науковий керівник Держко Олег Володимирович, доктор фізико-математичних  
наук, професор

Львів — 2021



## АНОТАЦІЯ

*Гутак Т.І.* Термодинаміка фрустрованих квантових спінових систем. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора філософії за спеціальністю 104 — Фізика та астрономія. — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2021.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню термодинаміки квантових фрустрованих спінових систем. Розуміння спостережуваних властивостей магнітоактивних діелектричних кристалів потребує розуміння ґраткових спінових моделей. Якщо обмінні взаємодії між сусідніми магнітними йонами конкурують так, що дуже багато спінових конфігурацій мають однакову енергію і не виникає жодного магнітного порядку, то маємо справу із фрустраціями. Фрустрації разом з квантовими флуктуаціями, а також з тепловими флуктуаціями можуть бути причиною появи несподіваних макроскопічних властивостей. З другого боку, аналіз таких властивостей становить труднощі через нестачу методів обчислень (аналітичних і числових), які належно враховували б особливості фрустрованих квантових спінових систем.

Деякі одновимірні декоровані (фрустровані) моделі Ізинга при певних значеннях модельних параметрів (обмінних взаємодій і магнітних полів) виявляють незвичні для одновимірних систем низькотемпературні властивості [L. Gáliková and J. Strečka, *Phys. Rev. E* **91**, 022134 (2015)]. При певному скінченному значенні температури перші похідні від вільної енергії, такі як внутрішня енергія чи ентропія, мають стрибкоподібну залежність. Водночас другі похідні від вільної енергії — теплоємність чи магнітна сприйнятливність, а також кореляційна довжина сягають аномально великих значень. При цьому вільна енергія і вищезгадані термодинамічні величини залишаються аналітичними функціями температури. Ці низькотемпературні особливості одновимірних декорованих систем в літературі називають псевдопереходами, а температуру, при якій вони спостерігаються — псевдокритичною температурою. Відомо, що у певному інтервалі температур по-

близу псевдокритичної температури (але не у псевдокритичній точці) такі моделі виявляють степеневу поведінку кореляційної довжини, теплоємності чи магнітної сприйнятливості із показниками, які не погоджуються з добре відомими співвідношеннями скейлінгу. У дисертаційній роботі пояснено природу псевдопереходів. Для того, щоб виявити причину цих низькотемпературних особливостей розглянуто декілька декорованих систем: двонога драбинка Ізинга із тримерними шаблонами у нульовому магнітному полі, спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічний ланцюжок, спін-електронний ланцюжок подвійних тетраедрів і спін-1/2 ланцюжок подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга.

Застосувавши декораційно-ітераційне перетворення для двонової драбинки Ізинга із тримерними шаблонами, побудовано ефективний гамільтоніан на звичайній двоногій драбинці Ізинга із залежною від температури взаємодією на шаблях. При певному значенні температури (яке відповідає псевдокритичній температурі) обмінна взаємодія на шаблях дорівнює нулеві, що приводить до ефективного розщеплення драбинки на два невзаємодіючі ланцюжки Ізинга. Якщо псевдокритична температура є достатньо малою (у одиницях обмінної взаємодії вздовж ланцюжків), тоді спостерігатимуться сліди критичної поведінки простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі та нульовому полі. Показано, що в околі псевдокритичної температури (але не у псевдокритичній точці) модель виявляє квазікритичну поведінку: кореляційна довжина має квазікритичний показник  $\alpha = \alpha' = 1$ , а теплоємність  $\gamma = \gamma' = 3$ .

Декораційно-ітераційне перетворення для кількох декорованих класично-квантових ланцюжків приводить до ефективного гамільтоніану ланцюжка Ізинга із залежною від температури обмінною взаємодією і магнітним полем. У псевдокритичній точці ефективно магнітне поле дорівнює нулеві і модель відповідає простому ланцюжку Ізинга у нульовому полі. І у цьому випадку низькотемпературні особливості пов'язані із критичною поведінкою простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі та нульовому полі. Квазікритичні показники декорованих класично-квантових ланцюжків співпадають із отриманими для двонової драбинки Ізинга. Таким чином, встановлено причину виникнення псевдокритичної

поведінки для низки одновимірних декорованих (фрустрованих) моделей Ізинга.

Дослідження впливу геометричної фрустрації на термодинамічну поведінку квантових тривимірних спінових систем проводилося на прикладі ґратки пірохлору, яка є найбільш фрустрованою ґраткою у трьох вимірах. Для цього розглядається феромагнітна і антиферомагнітна квантова  $S = 1/2$  модель Гайзенберга на тривимірній ґратці пірохлору. Для обидвох випадків отримані результати порівнювалися із відповідними результатами для нефрустрованої моделі на простій кубічній ґратці. В наближенні середнього поля обидві ґратки еквівалентні (мають однакове число найближчих сусідів  $z = 6$ ). Тому при порівнянні термодинамічних величин вдається проілюструвати вплив геометричної фрустрації при скінченних температурах.

Термодинамічні та динамічні властивості квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга розглядалися методом двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова (наближення хаотичних фаз). В цьому наближенні ланцюжок рівнянь руху для двочасових функцій Гріна обривається на першому кроці і відразу ж приходимо до опису, який виходить за межі теорії середнього поля. В рамках такого опису спектр спінових хвиль моделі перенормовується параметром порядку (намагніченістю), для якого отримується самоузгоджене рівняння. З аналізу самоузгодженого рівняння для намагніченості знайдено значення критичної температури  $T_c$  і температурну залежність намагніченості у феромагнітній фазі і однорідної магнітної сприйнятливості у парамагнітній фазі. Обчислені результати для намагніченості та теплоємності (для температур нижче критичної) і однорідної магнітної сприйнятливості (для температур вище критичної) порівнювалися із результатами симуляцій методом квантового Монте Карло. Обчислений динамічний структурний фактор порівнювався з експериментом із непружним розсіянням нейтронів для сполуки  $\text{Lu}_2\text{Mo}_2\text{O}_5\text{N}_2$ . Отриманий в наближенні Тяблікова динамічний структурний фактор якісно правильно описує експериментальні дані.

Термодинаміка квантового  $S = 1/2$  антиферомагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору розглядалась в рамках методу ентропії [B. Vernu and C. Lhuillier, Phys. Rev. Lett. **114**, 057201 (2015)]. На основі високотемпературних розвинень

до тринадцятого порядку за оберненою температурою для теплоємності та магнітної сприйнятливості проводилась інтерполяція за припущення про різні сценарії низькотемпературної поведінки. Низькотемпературна поведінка теплоємності залежить від спектру низькоенергетичних збуджень системи. У випадку безщілинного спектру теплоємність має степеневу асимптотику  $c \propto T^\alpha$ , а у випадку спектру із щілиною — термічно активовану асимптотику  $c \propto e^{-\Delta/T}$ . У роботі досліджувалась інтерполяція методом ентропії для обидвох випадків. При доступному тринадцятому порядку високотемпературних розвинень самоузгоджена процедура в методі ентропії, побудована на аналізі найбільшої кількості близьких Паде апроксимант, дає підстави вважати, що сценарій безщілинного спектру більш достовірний з можливими значеннями показників степеневої асимптотики теплоємності  $\alpha = 3/2, 2, 5/2$ . Температурний профіль теплоємності  $c(T)$  не містить низькотемпературних особливостей типу додаткового максимуму чи плеча. Однак, максимум теплоємності значно зсунутий в область низьких температур  $T \approx 0.25$  (в одиницях обмінної взаємодії  $J$ ). Така поведінка спостерігається безвідносно до припущень про спектр низькоенергетичних збуджень. Магнітна сприйнятливість  $\chi(T)$  має широкий максимум. Для значень  $\chi_0 = 0.08, \dots, 0.1$  ( $\chi_0$  є значення магнітної сприйнятливості при  $T = 0$ ) результати методу ентропії добре узгоджуються із даними симуляцій методом діаграматичного Монте Карло.

Ключові слова: декоровані ланцюжки Ізинга, псевдокритична поведінка, ґратка пірохлору, метод двочасових функцій Гріна, високотемпературні розвинення, метод ентропії.

## ABSTRACT

*Hutak T.I.* Thermodynamics of frustrated quantum spin systems. — Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Philosophy on the speciality 104 — Physics and Astronomy. — Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2021.

The thesis is devoted to the study of the thermodynamics of the frustrated quantum spin systems. Understanding of the observable properties of Mott insulators requires understanding of the lattice spin models. When the exchange interactions between the neighboring magnetic ions compete in such a way that a lot of spin configurations have the same energy and there is no magnetic order, one faces frustration. Frustration together with the quantum and thermal fluctuations can lead to appearance of new unexpected macroscopic properties. On the other hand, analysis of such systems is a difficult task due to the absence of reliable analytical and numerical methods for the frustrated quantum spin systems.

Some one-dimensional decorated (frustrated) Ising models show peculiar low-temperature behavior for particular sets of model parameters (intersite exchange interactions and magnetic fields), see e.g., L. Gálisová and J. Strečka, *Phys. Rev. E* **91**, 022134 (2015). At some finite temperature, the values of the first derivatives of the free energy, namely, the internal energy and the entropy, exhibit a very steep rise and fall behavior. At the same time, the second derivatives of the free energy such as the specific heat and the magnetic susceptibility as well as the correlation length reach abnormally large values. However, the free energy and the above mentioned thermodynamic functions remain continuous functions of the temperature. Such an unexpected low-temperature behavior was coined the pseudo-transition and the corresponding temperature was coined the pseudocritical temperature. Such systems show a power-law behavior in the vicinity of the pseudocritical temperature (but not at the pseudocritical point) characterized by quasicritical exponents which contradict well-known scaling relations. To reveal the reason for the emergence

of pseudo-transitions, we consider a number of decorated one-dimensional systems. Namely, the two-leg ladder Ising model with trimer rungs, the spin-1/2 Ising- $XYZ$  diamond chain, the double-tetrahedral chain of localized Ising spins and mobile electrons, and the spin-1/2 Ising-Heisenberg double-tetrahedral chain.

After a decoration-iteration transformation, the effective Hamiltonian for the two-leg ladder Ising model with trimer rungs becomes the simple two-leg rail-road Ising ladder Hamiltonian with the temperature-dependent interactions  $J_{\perp}(T)$  for the interleg coupling. At some finite temperature  $T_p$  (pseudocritical temperature)  $J_{\perp}(T)$  vanishes:  $J_{\perp}(T_p) = 0$ . Effectively, this corresponds to a splitting of the two-leg ladder into two independent Ising chains. For sufficiently small values of the pseudocritical temperature (in the units of exchange coupling of the chain), the traces of the simple Ising chain criticality at zero temperature and zero field are clearly seen. Around the pseudocritical temperature (but not in the immediate vicinity of the pseudocritical temperature) the model shows pseudo-critical behavior. The correlation length follows a power law with the quasicritical exponent  $\alpha = \alpha' = 1$  and the specific heat follows a power law with the quasicritical exponent  $\gamma = \gamma' = 3$ .

The decoration-iteration transformation for a number of considered decorated classical-quantum chains leads to the simple Ising chain Hamiltonian with the temperature-dependent exchange interaction and magnetic field. The effective magnetic field vanishes at the pseudocritical temperature and, consequently, the model corresponds to the simple Ising chain at zero magnetic field. Therefore, the low-temperature peculiarities of the decorated Ising chains show up from the simple Ising chain criticality at the zero temperature and field. Quasicritical exponents of the decorated classical-quantum chains coincide with the ones obtained for the two-leg Ising ladder. As a result, the reason for the peculiar low-temperature behavior of some spin-1/2 decorated (frustrated) one-dimensional Ising models has been revealed.

To study the influence of geometrical frustration on thermodynamics of a three-dimensional quantum spin systems we consider a pyrochlore lattice. The py-



rochlore lattice is the most frustrated lattice in three dimensions. The results for the ferromagnetic and antiferromagnetic quantum  $S = 1/2$  Heisenberg model should be compared to the corresponding results for the unfrustrated model on a simple cubic lattice. Both lattices are indistinguishable at the mean-field level having the same number of nearest neighbor sites  $z = 6$ . The comparison between thermodynamic observables allows to illustrate the effect of geometrical frustration at finite temperatures.

Thermodynamic and dynamic properties of quantum  $S = 1/2$  ferromagnetic Heisenberg model were studied by the double-time temperature-dependent Green functions method within the random phase approximation. The equations of motion were decoupled at the first step. Such approximation yields already a description beyond the mean-field theory level. The spin-wave spectrum is renormalized by the order parameter (magnetization) which in turn satisfies a self-consistent equation. The value of the critical temperature  $T_c$  and the temperature dependence of the magnetization in the ferromagnetic phase and the magnetic susceptibility in the paramagnetic phase were found from the analysis of the self-consistent equation for magnetization. We compare the magnetization and the specific heat (for the temperatures below the critical one) and the magnetic susceptibility (for the temperatures above the critical one) with the results of quantum Monte Carlo simulations. The dynamic structure factor was compared with inelastic neutron scattering data for  $\text{Lu}_2\text{Mo}_2\text{O}_5\text{N}_2$  material and a satisfactory agreement has been found.

To study the thermodynamics of the quantum  $S = 1/2$  antiferromagnetic Heisenberg model we used the entropy method [B. Bernu and C. Lhuillier, Phys. Rev. Lett. **114**, 057201 (2015)]. The interpolation between high temperatures (based on the 13-th order high-temperature expansion for the specific heat and the magnetic susceptibility) and low temperatures according to different scenarios for the low-energy excitation spectrum has been made. The low-temperature dependence of the specific heat is determined by the nature of low-energy excitation spectrum of the system. In the case of gapless spectrum, the specific heat follows a power-law behavior  $c \propto T^\alpha$ , whereas for the gapped spectrum, the specific heat

is thermally activated, i.e.,  $c \propto e^{-\Delta/T}$ . The interpolation within the framework of the entropy method was made for both cases. We apply a self-consistent procedure within the entropy method based on the largest number of coinciding Pade approximants to analyze the thermodynamic observables. For the available order of the high-temperature expansion, the assumption of the gapless spectrum is more robust with the best results for the exponent  $\alpha = 3/2, 2, 5/2$ . The specific heat  $c(T)$  does not have any extra low-temperature features like a peak or shoulder. However, the location of the main maximum is significantly shifted to lower temperatures  $T \approx 0.25$  (in the units of the exchange coupling  $J$ ). This behavior is independent of the assumed type of low-energy excitations. The magnetic susceptibility  $\chi(T)$  has a broad maximum. For the value  $\chi_0 = 0.08, \dots, 0.1$  ( $\chi_0$  is the susceptibility at  $T = 0$ ) the entropy method results agree well with the diagrammatic Monte Carlo simulations data.

Keywords: decorated Ising chains, pseudo-critical transitions, pyrochlore lattice, double-time Green function method, high-temperature expansion, entropy method.

### Список публікацій здобувача

1. The spin-1/2 Heisenberg ferromagnet on the pyrochlore lattice: A Green's function study / T. Hutak, P. Müller, J. Richter, T. Krokhumalskii, O. Derzhko // [Condensed Matter Physics](#). — 2018. — Vol. 21, no. 3(33705). — P. 1–13.
2. Adapting Planck's route to investigate the thermodynamics of the spin-half pyrochlore Heisenberg antiferromagnet / O. Derzhko, T. Hutak, T. Krokhumalskii, J. Schnack, J. Richter // [Phys. Rev. B](#). — 2020. — Vol. 101. — P. 174426.
3. Low-temperature thermodynamics of the two-leg ladder Ising model with trimer rungs: A mystery explained / T. Hutak, T. Krokhumalskii, O. Rojas, S. M. de Souza, O. Derzhko // [Physics Letters A](#). — 2021. — Vol. 387. — P. 127020.
4. Towards low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains / T. Krokhumalskii, T. Hutak, O. Rojas, S. M. de Souza, O. Derzhko // [Physica A: Statistical Mechanics and its Applications](#). — 2021. — Vol. 573. — P. 125986.
5. Гутак Т. Термодинаміка квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 7–8 червня, 2018. Тези доповідей. Львів, 2018. С. 42.
6. Гутак Т. Термодинаміка спінових систем: від високих до низьких температур // XIX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 13–14 червня, 2019. Тези доповідей. Львів, 2019. С. 31.
7. T. Hutak, T. Krokhumalskii, O. Derzhko, and J. Richter, Thermodynamics of the  $S = 1$  Heisenberg antiferromagnet on kagome lattice // *Statistical Physics: Modern Trends and Applications 3–6 July 2019, Lviv, Ukraine. Book of abstracts*. Lviv, 2019. P. 114.

8. T. Krokhmalkii, T. Hutak, O. Rojas, S. M. de Souza, and O. Derzhko, Low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains // Statistical Physics: Modern Trends and Applications 3–6 July 2019, Lviv, Ukraine. Book of abstracts. Lviv, 2019. P. 115.
9. Гутак Т. Термодинаміка квантового  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору // XX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 15–16 жовтня, 2020. Тези доповідей. Львів, 2020. С. 30.
10. Гутак Т. Термодинамічні і динамічні властивості  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на пилкоподібному ланцюжку // XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 11–13 жовтня, 2021. Тези доповідей. Львів, 2021. С. 19.

## ЗМІСТ

<b>Вступ</b>		<b>13</b>
<b>1</b>	<b>Фрустровані ґраткові спінові системи при нульовій та скінченних температурах (огляд)</b>	<b>21</b>
<b>2</b>	<b>Псевдопереходи в одновимірних класичних і класично-квантових спінових системах</b>	<b>31</b>
2.1	Вступ: декоровані моделі Ізинґа . . . . .	31
2.2	Двонога драбинка Ізинґа з декорованими щаблями . . . . .	36
2.3	Ланцюжок Ізинґа з квантовими декораціями . . . . .	44
2.4	Висновки . . . . .	57
<b>3</b>	<b>Квантова модель Гайзенберґа на тривимірній ґратці пірохлору</b>	<b>60</b>
3.1	Вступ: ґратка пірохлору і фізика магнетизму . . . . .	60
3.2	Метод функцій Гріна для квантового феромагнетика Гайзенберґа на ґратці пірохлору . . . . .	65
3.3	Метод ентропії . . . . .	76
3.4	Застосування методу ентропії до квантового антиферомагнетика Гайзенберґа на ґратці пірохлору . . . . .	81
3.5	Висновки . . . . .	90
<b>4</b>	<b>Основні положення дисертації</b>	<b>91</b>
	<b>Список використаних джерел</b>	<b>94</b>

<b>А Деталі деяких обчислень у наближенні Тяблікова</b>	<b>111</b>
А.1 Наближення середнього поля . . . . .	111
А.2 Рівняння руху для двочасових функцій в наближенні Тяблікова . .	112
А.3 Обчислення внутрішньої енергії в наближенні Тяблікова . . . . .	114
<b>Б Деякі допоміжні результати у методі ентропії на гратці пірохлору</b>	<b>118</b>
<b>В Список публікацій здобувача</b>	<b>122</b>
<b>Г Апробація результатів дисертації</b>	<b>124</b>

## ВСТУП

**Актуальність теми.** Фрустровані квантові спінові системи є серед найцікавіших об'єктів у фізиці магнетизму [1–5]. Конкуренція обмінних взаємодій між сусідніми локалізованими магнітними моментами, спричинена геометричною фрустрацією, приводить до різноманіття нових екзотичних фаз (наприклад, до стану квантової спінової рідини, спінового льоду тощо). Проблема еспериментального підтвердження [6] чи навіть класифікації основних станів таких систем [7] ще далека від остаточного вирішення.

Окрім декількох спеціальних випадків (наприклад, для квантової моделі Кітаєва на шестикутній ґратці [8]), точні розв'язки для фрустрованих спінових систем знайти не вдається. Значний прогрес у числових дослідженнях квантових спінових систем на двопідґраткових ґратках досягнуто числовими симуляціями методом квантового Монте Карло [9]. Однак, для геометрично фрустрованих систем цей потужний метод не застосовний через так звану «проблему знаку» [10]. Симуляції одновимірних і двовимірних квантових спінових систем методом точної діагоналізації [11, 12] і методом ренормалізаційної групи для матриці густини [13–16] дають змогу отримати точні результати для скінченних систем. Але доступні зараз розміри таких систем не завжди достані для того, щоб надійно описувати спостережувані величини у термодинамічній границі. Брак методів особливо відчутний для тривимірних фрустрованих квантових спінових систем.

Важливу роль у фізиці магнетизму спінових систем відіграють так звані декоровані моделі Ізинга [17]. Із допомогою декораційно-ітераційного перетворення і перетворення трикутник-зірка для певних Ізингових моделей вдається обчислити статистичну суму, а відтак і знайти термодинамічні спостережувані. Останнім часом активно досліджуються одновимірні декоровані моделі Ізинга. Роль деко-

рації відіграють різноманітні класичні чи квантові скінченні системи (наприклад, спіни Гайзенберга [18, 19] чи електрони із взаємодією Габарда [20]). Такі моделі можна успішно застосовувати для опису термодинамічних величин реальних матеріалів, наприклад, полімерних ланцюжків  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  [21, 22] і  $[\text{DyCuMoCu}]_\infty$  [23]. Нещодавно для низки таких моделей було виявлено незвичну низькотемпературну поведінку термодинамічних величин, яка поблизу певного скінченного значення температури нагадує фазові переходи першого і другого роду [20], а кореляційна довжина, теплоємність і магнітна сприйнятливність сягають величезних значень і виявляють степеневу поведінку [24].

Найбільш геометрично фрустрованою ґраткою у тривимірному просторі є ґратка пірохлору. Дослідження властивостей основного стану квантової антиферромагнітної моделі Гайзенберга на цій ґратці є предметом досліджень протягом останніх тридцяти років. Попри значні зусилля, природа основного стану і низькоенергетичних збуджень досі не відома. Через брак доступних методів термодинамічну поведінку моделі досліджували ще менше.

Актуальність дисертаційної роботи полягає у дослідженні декорованих одновимірних систем Ізинга, які виявляють незвичну поведінку при скінченних температурах. Ці низькотемпературні особливості активно обговорюють в літературі протягом останніх п'яти років [18, 20, 24–27]. Запропонований у дисертаційній роботі аналіз ефективних гамільтоніанів таких моделей дозволяє виявити причину виникнення цих низькотемпературних особливостей. Розгляд термодинаміки квантового  $S = 1/2$  ферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору методом двочасових функцій Гріна в наближенні хаотичних фаз заповнює прогалину у теоретичних дослідженнях цієї моделі. Отримані результати для теплоємності та магнітної сприйнятливості квантового  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору методом ентропії є одними з перших, де термодинаміка цієї моделі отримана на всьому температурному інтервалі. Ці результати можуть бути корисними для подальших експериментальних і теоретичних досліджень цієї моделі. Крім того, метод ентропії дозволяє отримати і енергію основного стану  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору. Ця проблема інтен-



сивно обговорюється останні два роки [15, 28].

**Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України. Представлені в дисертації результати отримані згідно з планами робіт в рамках бюджетних тем НАН України: “Квантові багаточастинкові ґраткові системи”: динамічний відгук і ефекти сильних кореляцій” (2013-2017 рр., номер держреєстрації 0112U007761), “Сильні кореляції і конкуренції взаємодій у класичних і квантових ґраткових системах різної вимірності” (2018-2022 рр., номер держреєстрації 0118U003010) і “Ефекти фрустрації у квантових спінових системах” (2019 р., номер держреєстрації 0191U103413).

**Мета і задачі дослідження.** *Об'єктом дослідження* є геометрично фрустровані квантові спінові ґраткові системи у різних вимірностях простору.

*Предмет дослідження* — термодинамічна поведінка геометрично фрустрованих систем: низькотемпературні особливості одновимірних декорованих моделей Ізинга (псевдопереходи) і термодинамічні властивості квантової  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору з феромагнітною чи антиферомагнітною міжвузловими взаємодіями у всьому інтервалі температур.

*Метою роботи* є дослідження впливу геометричної фрустрації на спостережувані величини (теплоємність, намагніченість, сприйнятливість тощо) при скінченних температурах для квантових спінових систем у різній вимірності простору.

*Завданнями роботи* є:

- дослідити низькотемпературну поведінку двонової драбинки Ізинга у нульовому магнітному полі; дослідити причину виникнення аномально великих значень кореляційної довжини і теплоємності, а також стрибкоподібну залежність внутрішньої енергії і ентропії при певних скінченних температурах;

- дослідити низькотемпературну поведінку декорованих ланцюжків Ізинга: спін- $1/2$  Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка, спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів і спін- $1/2$  ланцюжка подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга; дослідити аномально великі значення кореляційної довжини, теплоємності й магнітної сприйнятливості, а також стрибкоподібну залежність внутрішньої енергії

і ентропії від температури при певних скінченних температурах;

- дослідити термодинаміку квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору в рамках методу двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова; отримати значення критичної температури, а також температурну залежність намагніченості і теплоємності (для температур нижче критичної) і магнітної сприйнятливості (для температур вище критичної) у цьому наближенні; результати порівняти із симуляціями методом квантового Монте Карло, високотемпературними розвиненнями і результатами методу двочасових функцій Гріна в наближенні Кондо–Ямаджі; результати для динамічного структурного фактора порівняти із експериментальними;

- дослідити термодинаміку квантового  $S = 1/2$  антиферомагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору в рамках методу ентропії; провести інтерполяцію високотемпературних розвинень для теплоємності й магнітної сприйнятливості за того чи іншого припущення про можливий сценарій низькотемпературної поведінки системи; оцінити значення енергії основного стану моделі; отримані результати порівняти із симуляціями методом діаграматичного Монте Карло для високих і проміжних температур.

**Методи дослідження.** У роботі використовується метод матриці переносу для обчислення статистичної суми декорованих одновимірних моделей Ізинга, метод двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова для обчислення термодинамічних і динамічних величин квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору, метод ентропії для обчислення термодинамічних величин квантового  $S = 1/2$  антиферомагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору. Використовуються і числові методи для конструювання інтерполяцій та розв’язування систем рівнянь, побудови Паде апроксимант тощо.

**Наукова новизна одержаних результатів.** У дисертаційній роботі отримано ефективний гамільтоніан для двонової драбинки Ізинга із тримерними шаблонами. На його основі встановлено, що низькотемпературні особливості цієї системи, які обговорювалися у двох роботах В. Їна 2020 року [26, 27], пов’язані із ефективним розщепленням драбинки на два ланцюжки Ізинга. На основі ана-

лізу ефективних гамільтоніанів для спін- $1/2$  Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка, спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів і спін- $1/2$  ланцюжка подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга було показано, що їхня незвична низькотемпературна поведінка і квазікритична поведінка поблизу скінченної температури  $T_p$  зумовлена критичною поведінкою простого одновимірного ланцюжка Ізинга в нульовому магнітному полі, коли  $T \rightarrow 0$ . Це пояснило чому спостерігаються псевдопереходи, які почали інтенсивно обговорювати починаючи із статті Л. Галісової та Й. Стречки 2015 р. [20].

Термодинамічні і динамічні величини для квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга досліджувались методом двочасових функцій Гріна в наближенні хаотичних фаз. Отримані результати заповнили прогалину у аналітичних дослідженнях цієї моделі (досі таких результатів не було) і показали застосовність методу двочасових функцій Гріна до такого типу спінових моделей. Цілком нове застосування методу ентропії, запропонованого Б. Берну і співробітниками [29], до  $S = 1/2$  антиферомагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору є предметом найсвіжіших обговорень і порівняння із здобутками симуляцій методом ренормалізаційної групи для матриці густини [15] і симуляцій методом багатозмінного варіаційного Монте Карло [28]. Вперше побудовано термодинаміку (теплоємність і магнітну сприйнятливність) квантового  $S = 1/2$  антиферомагнетика Гайзенберга для всіх температур  $0 \leq T < \infty$  у методі ентропії.

**Практичне значення одержаних результатів.** Отримані результати можуть бути основою для подальших теоретичних студій, а також використані для аналізу експериментальних даних для пірохлорів, двовимірних фрустрованих квантових магнетиків (наприклад, на гратці квадратне кагоме). Окремі фрагменти представленого у дисертації дослідження можна використати у спецкурсах для аспірантів.

**Особистий внесок здобувача.** Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи доктор фізико-математичних наук, професор О. В. Держко. У спільних публікаціях автору дисертації належить:

- застосування декоративно-ітераційного перетворення до двоногій драбинки Ізинга із тримерними щаблями; аналітичні обчислення і аналіз термодинамічних величин;
- аналіз ефективних гамільтоніанів для спінів- $1/2$  Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка, спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів і спінів- $1/2$  ланцюжка подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга і побудова фазових діаграм на площині  $T/J - H/J$ ; аналіз термодинамічних величин;
- отримання рівнянь руху для двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова, аналіз самоузгодженого рівняння для намагніченості, аналітичні обчислення для сприйнятливості і теплоємності;
- аналіз високотемпературних розвинень теплоємності і магнітної сприйнятливості методом Паде апроксимант і методом ентропії; розробка програм для реалізації цих методів.

**Апробація результатів дисертації.** Результати досліджень було представлено на конференціях: XVIII, XIX, XX, XXI Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2018, 2019, 2020 та 2021 рр.), Statistical Physics: Modern Trends and Applications (Львів, 2019) і Korrelationstage 2021 (Дрезден, 2021), а також на семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України і семінарах відділів статистичної теорії конденсованих систем і квантової статистики цього інституту.

**Публікації.** За матеріалами дисертації опубліковано 10 наукових праць, з них: 4 статті у фахових наукових виданнях [30–33] та 6 тез конференцій.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертація складається із вступу, розділу з оглядом літератури та двох розділів основної частини, у яких викладені результати досліджень дисертанта, а також загальних висновків, списку використаної літератури, 4 додатків, 46 рисунків та 3 таблиць. Робота викладена на 93 сторінках (повний обсяг разом з літературою та додатками — 124 сторінки), бібліографічний список містить 172 найменування публікацій у вітчизняних та закордонних виданнях.

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

У **першому розділі** проведено огляд літератури за темою дисертаційної роботи. Обговорено вплив геометричної фрустрації на поведінку спінових ґраткових систем в основному стані при  $T = 0$  і при скінченних температурах  $T > 0$ . Особливу увагу відведено обговоренню моделей, які мають експериментальну реалізацію, і на відкриті питання в теорії і фізиці квантового магнетизму. Також обговорено наявні методи і сучасний стан комп'ютерних симуляцій. В кінці розділу сформульовано задачі, які розглядатимуться в дисертаційній роботі.

**Другий розділ** присвячений дослідженню низькотемпературних особливостей одновимірних декорованих драбинок і ланцюжків Ізинга. Розділ починається із вступної частини. Вводяться поняття декорованої моделі Ізинга і приклади експериментальних сполук, які реалізують такі системи. Наведений короткий огляд проблеми низькотемпературних особливостей у одновимірних моделях Ізинга. У наступних підрозділах розглядаються 1) двонога драбинка Ізинга із декорованими щаблями і 2) ланцюжки Ізинга із квантовими декораціями. Розгляд ведеться на мові ефективних гамільтоніанів для таких моделей. Встановлено зв'язок досліджених моделей із слідами критичної поведінки простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі та нульовому полі. Як наслідок, виявлено причину виникнення низькотемпературних особливостей і псевдокритичної поведінки. Розділ завершується висновками. Результати цього розділу опубліковано у роботах [32, 33].

**Третій розділ** присвячений дослідженню впливу геометричної фрустрації на термодинаміку квантової  $S = 1/2$  феромагнітної і антиферомагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору. Розділ починається із вступної частини, де особливу увагу звернено на експеримент. В наступних підрозділах розглядаються властивості феромагнітної і антиферомагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору. Термодинаміка феромагнетика розглядається методом двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова (наближення хаотичних фаз). Отримані результати для критичної температури, намагніченості, теплоємності і магнітної сприйнятливості.

вості порівнюються із симуляціями методом квантового Монте Карло і результатами інших методів. Обчислений динамічний структурний фактор порівнюється із даними непружного розсіяння нейтронів для сполуки  $\text{Lu}_2\text{Mo}_2\text{O}_5\text{N}_2$ . Термодинаміка  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору досліджується методом ентропії. Інтерполяція між високотемпературними розвиненнями і низькотемпературною поведінкою для теплоємності та магнітної сприйнятливості проводиться в припущенні різних типів спектру низькоенергетичних збуджень системи. Отримана оцінка енергії основного стану порівнюється із нещодавніми симуляціями для скінченних систем: методом ренормалізаційної групи для матриці густини ( $N = 128$ ) [15] і методом багатозмінного варіаційного Монте Карло ( $N = 256$ ) [28]. Розділ завершується висновками. Результати цього розділу опубліковано у роботах [30, 31].

Дисертаційна робота завершується **Основними положеннями дисертації**, **Списком використаних джерел** та **Додатками**.

## РОЗДІЛ 1

# ФРУСТРОВАНІ ГРАТКОВІ СПІНОВІ СИСТЕМИ ПРИ НУЛЬОВІЙ ТА СКІНЧЕННИХ ТЕМПЕРАТУРАХ (ОГЛЯД)

Для звичайних магнітних діелектричних матеріалів обмінна взаємодія між локалізованими магнітними моментами (спінами) на гратці приводить до фазового переходу при температурі  $T_c$  між високотемпературною неупорядкованою фазою ( $T > T_c$ ) і магнітовпорядкованою фазою при низьких температурах ( $T < T_c$ ). Зазвичай, це явище супроводжується сингулярною поведінкою термодинамічних величин при проминанні значення критичної температури  $T_c$ . Із пониженням температури система переходить у єдиний основний стан, водночас ентропія системи (на спіні) прямує до нуля. Така поведінка зумовлена тим, що певне магнітне впорядкування спінів, яке диктує взаємодія, є енергетично вигіднішим за інші. Однак, для деяких систем існує макроскопічно багато низькоенергетичних спінових конфігурацій із однаковою енергією. Це зумовлює сильне виродження основного стану і, як наслідок, відсутність магнітного порядку і ненульове значення залишкової ентропії. Вперше на таку незвичну поведінку звернув увагу Лайнус Полінг [34], помітивши, що атоми водню у кристах льоду залишатимуться неупорядкованими навіть при нульовій температурі. Кількість протонних конфігурацій «два всередину, два назовні» навколо іонів кисню зростає експоненційно із розміром системи.

Поняття про геометричну фрустрацію у магнітних спінових системах з'явилося на початку п'ятдесятих років минулого століття. На відміну від звичайних двошідграткових антиферромагнетиків (наприклад, на квадратній чи шестикутній гратці), модель Ізинга на трикутній [35] гратці і гратці кагоме [36] не



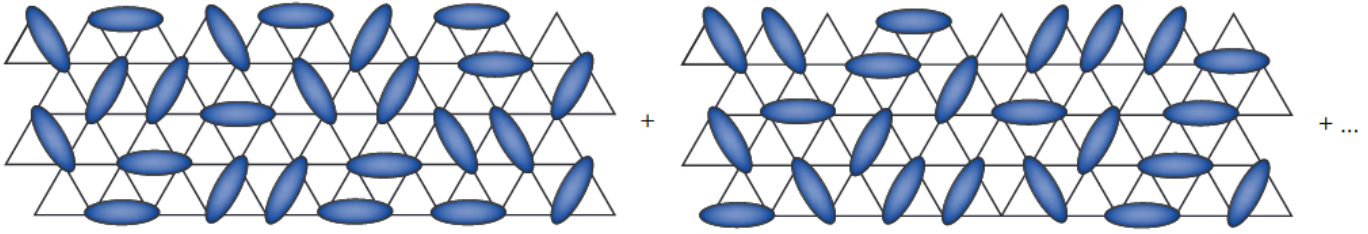


Рис. 1.1. Ілюстрація стану резонансних валентних зв'язків на трикутній ґратці. Еліпсами зображені синглетні стани двох  $S = 1/2$  спінів Гайзенберга на вузлах  $i$  та  $j$ :  $(|\uparrow_i\downarrow_j\rangle - |\downarrow_i\uparrow_j\rangle)/\sqrt{2}$ . Рисунок адаптовано із [1].

виявляє магнітного порядку при будь-якій температурі  $T \geq 0$ . Трохи згодом Філіп Андерсон виявив, що короткосяжні антиферромагнітні взаємодії Ізинга не приводять до магнітного впорядкування і на тривимірній ґратці пірохлору і тільки далекосяжні взаємодії можуть зумовити виникнення тут магнітного порядку типу Нееля. Виявилось, що ця модель також має ненульову залишкову ентропію і вона пов'язана із задачею Полінга.

На відміну від класичної моделі Ізинга, точних розв'язків для квантових спінових моделей, окрім декількох випадків [37, 38], немає. Чи не найвідомішим із таких винятків є одновимірний  $S = 1/2$  ланцюжок Гайзенберга. Із точного розв'язку Ганса Бете [39] випливає, що в основному стані модель знаходиться у повністю неупорядкованому стані квантової спінової рідини. Така поведінка головно зумовлена вимірністю ланцюжка, оскільки одновимірні системи з неперервною симетрією не можуть впорядковуватися навіть при нульовій температурі [40]. Для двовимірних моделей магнітний порядок відсутній при скінченних температурах, однак при  $T = 0$  може виникати впорядкований стан. Вперше на можливість виникнення антиферромагнітного порядку Нееля в основному стані для  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці вказав Андерсон, побудувавши теорію спінових хвиль для цієї моделі [41].

Геометрія трикутної ґратки мала б природньо запобігати виникненню магнітного порядку при  $S = 1/2$ . У 1973 році Андерсон припустив, що квантова  $S = 1/2$  модель Гайзенберга із взаємодією між найближчими сусідами на трикутній ґратці може перебувати у стані квантової спінової рідини [42, 43]. Такий



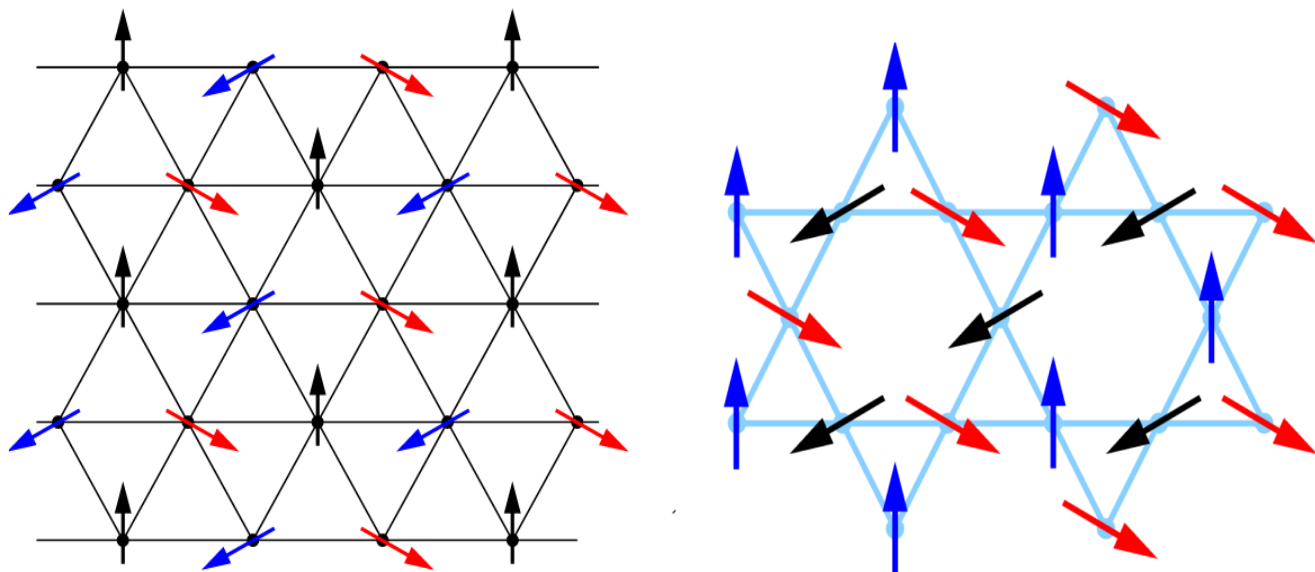


Рис. 1.2. Ілюстрація стану класичного  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  стану моделі Гайзенберга на трикутній ґратці (ліворуч) і ґратці каґоме (праворуч). Ілюстрації адаптовані із робіт [47, 48].

стан є станом резонансних валентних зв'язків, який є суперпозицією синглетних станів, утворених між двома  $S = 1/2$  спінами, які флюктують подібно до рідини (на відміну від статичного магнітного порядку типу феромагнітного чи порядку Нееля), див. рис. 1.1. Наступне десятиліття ця ідея перебувала у відносному забутті, аж поки у 1987 році Андерсон не запропонував можливий зв'язок із високотемпературною надпровідністю купратів [44, 45]. За Андерсоном, електрони між сусідніми йонами купруму, взаємодіючи, формують резонансний валентний зв'язок, а при введенні у систему домішок поведуть себе як куперівські пари. Відтоді і дотепер фрустровані квантові спінові системи активно досліджуються як у зв'язку із високотемпературною надпровідністю (зокрема, дослідження  $S = 1/2$   $J_1 - J_2$  моделі на квадратній ґратці [46]), так і як системи із різноманітними екзотичними квантовими фазами [1–5].

Припущення Андерсона про спінову рідину як основний стан  $S = 1/2$  Гайзенбергового антиферомагнетика на трикутній ґратці виявилось помилковим. Згодом з'ясувалося, що основним станом  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на трикутній ґратці є все-таки магнітовпорядкований основний стан. Класична модель Гайзенберга на цій ґратці має так званий  $\sqrt{3} \times \sqrt{3}$  порядок в основному стані. В цьому

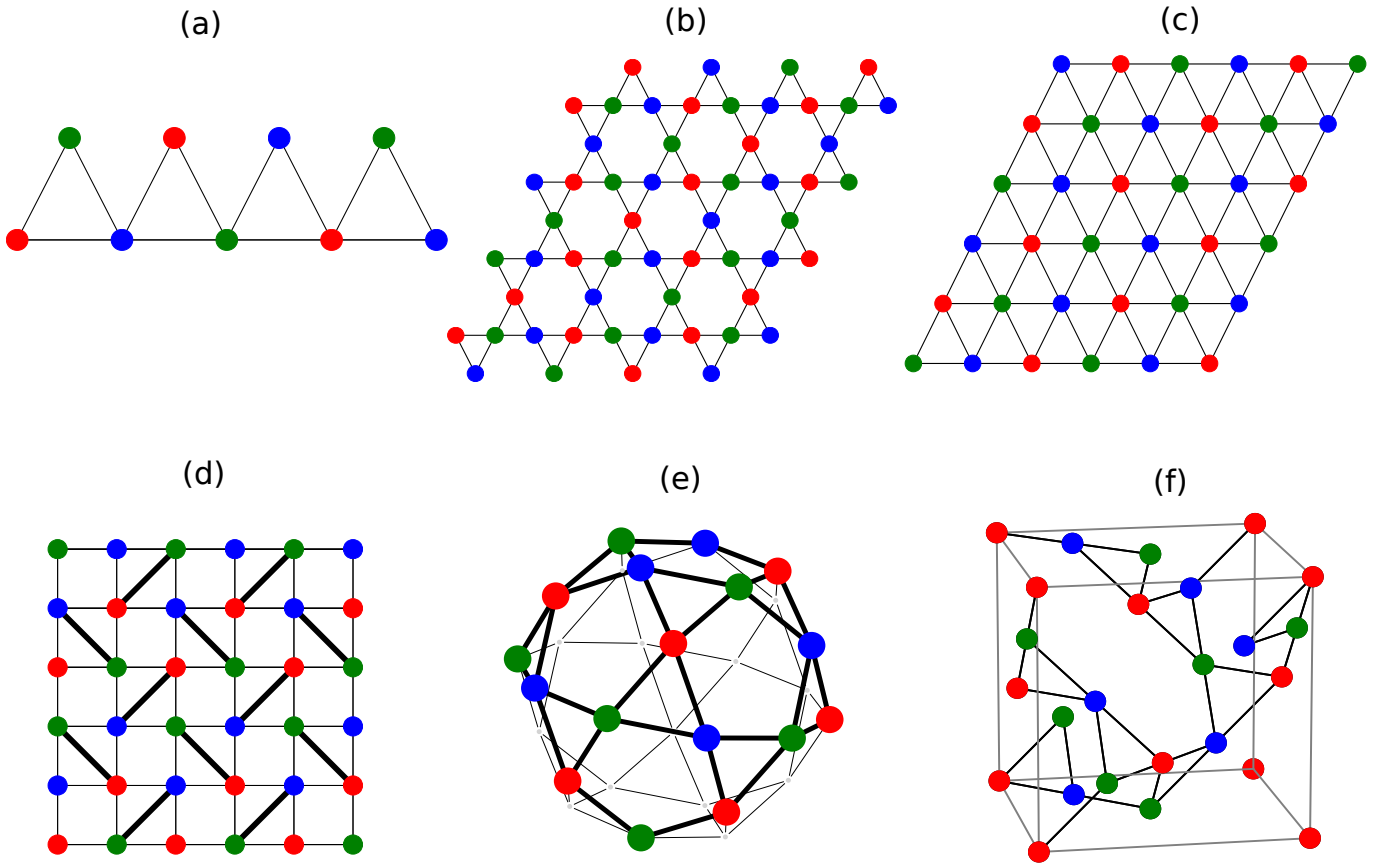


Рис. 1.3. Приклади геометрично фрустрованих систем, які дозволяють трикольорове розфарбування в основному стані: а) пилкоподібний ланцюжок, б) гратка кагоме, с) трикутна гратка, d) гратка Шастри-Сазерленда, е) ікосододекаедр, f) гратка гіперкагоме. Рисунок взято з [54].

випадку спіни розташовані таким чином, що на окремому трикутнику вони обернуті під кутом  $120^\circ$  градусів один відносно одного (див. ліву панель на рис. 1.2). Виявилося, що для трикутної гратки квантові флуктуації не руйнують (хоча і сильно редукують, намагніченість на вузол  $m \approx 0.4$  [49]) такий стан навіть для значення спіну  $S = 1/2$  [50, 51]. Цікаво, що така ж конфігурація класичних спінів є основним станом класичної  $S \rightarrow \infty$  моделі Гайзенберга на гратці кагоме. Що правда, для цієї гратки квантові флуктуації руйнують порядок для малих значень спіну починаючи із значення  $S = 3/2$  [52]. У випадку  $S = 1$  модель знаходиться у тримеризованому стані [53], тоді як для значення  $S = 1/2$  модель все-таки перебуває у стані квантової спінової рідини. Це чи не найвідоміша гратка, яка перебуває у стані квантової спінової рідини у вимірності простору  $D = 2$ .

Декілька років тому було знайдено ще один яскравий ефект, зумовнений гео-

метричною фрустрацією — макроскопічне виродження основного стану квантової  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на гратці кагоме і гіперкагоме [54]. Інші гратки, які складаються з трикутників із спільними вузлами і для яких можливе трикольорове розфарбування [54, 55], також проявляють цікаву поведінку (див. приклади таких систем на рис. 1.3). Автори розглянули  $S = 1/2$  анізотропну  $XXZ$  модель Гайзенберга із гамільтоніаном  $\mathcal{H} = \sum_{\langle i,j \rangle} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y + J_z S_i^z S_j^z)$ . При значенні  $J_z = -1/2$  у всіх секторах значень спіну  $S^z$  спостерігається значне виродження основних станів. У цій особливій точці на фазовій діаграмі основного стану, модель дуже чутлива до найменших збурень. Навколо неї є всі п'ять квантових фаз з фазової діаграми  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на гратці кагоме при  $T = 0$ . Дослідження таких моделей у границі низьких температур і малих магнітних полів показує, що у цій точці проявляються нові риси і у поведінці локалізованих магнонів (див., наприклад, роботу про таке дослідження на гратці пилкоподібний ланцюжок [56]).

Пошук експериментальної реалізації стану квантової спінової рідини для систем просторової вимірності більше одиниці триває вже кілька десятиліть. Серед багатьох кандидатів (наприклад, модель Гайзенберга із взаємодією між наступними ніж найближчі сусіди на трикутній гратці, гратці кагоме тощо) найбільш дослідженим є кристал герберсміту  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . Шари магнітних іонів міді  $\text{Cu}^{2+}$  формують ідеальну геометрію гратки кагоме. Однак, найбільшу експериментальну проблему становить заміщення магнітних іонів міді немагнітними іонами цинку (див. рис. 1.4) [57]. Це приводить до кристалічного безладу, вклад від якого важко відділити. Серед інших двовимірних кандидатів перспективно виглядають експерименти для сполук із геометрією гратки типу кагоме, наприклад октакагоме [58] чи квадратне кагоме [59, 60]. Щоправда, теоретично ці моделі досліджені ще недостатньо.

Зумовлена геометричною фрустрацією відсутність магнітного порядку може натомість приводити і до утворення так званих синглетних кристалів. Найбільш дослідженим експериментально і теоретично прикладом такої системи є гратка Шастри-Сазерленда. Вона вперше запропонована як двовимірне узагаль-

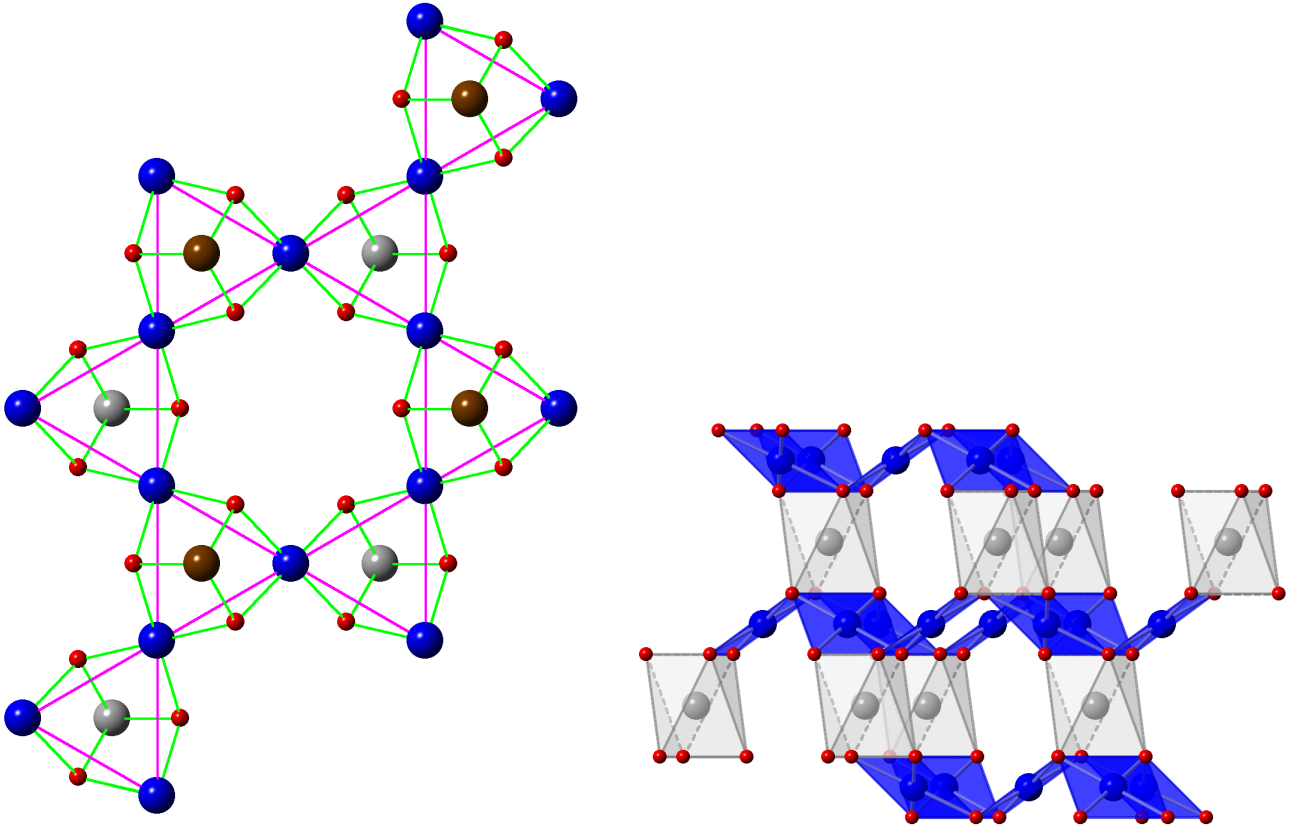


Рис. 1.4. Кристалічна структура герберсміту  $\text{ZnCu}_3(\text{OH})_6\text{Cl}_2$ . Магнітні йони купруму наведені синіми кульками, а немагнітні йони цинку сірими. Рисунок взято із [57].

нення ланцюжка Маджумдара-Гоша, де поряд із взаємодією між найближчими сусідами на звичайній квадратній ґратці також є взаємодія між наступними за найближчі сусіди, яка розташована у порядку ортогональних димерів (див. верхню ліву панель рис. 1.5). З одного боку, коли значення взаємодії на димерах  $J'$  більше значення обмінної взаємодії на квадратній ґратці  $J$ , основним станом системи буде добуток димерних синглетів. У протилежному випадку система буде мати антиферромагнітний порядок Нееля. Однак, перехід між цими граничними випадками відбувається через проміжну плакет-синглетну фазу <sup>1</sup>, див. ліву панель рис. 1.5.

$S = 1/2$  модель Шастри-Сазерленда має добру реалізацію в сполуці  $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$  з набором обмінних взаємодій, які знаходяться якраз перед пере-

<sup>1</sup>Зовсім нещодавні результати симуляцій методом DMRG свідчать, що перед плакет-синглетною фазою та антиферромагнітною фазою Нееля  $S = 1/2$  модель Шастри-Сазерленда проходить через проміжну фазу спінової рідини, яка знаходиться у дуже вузькому інтервалі відношення  $J/J'$  [62].

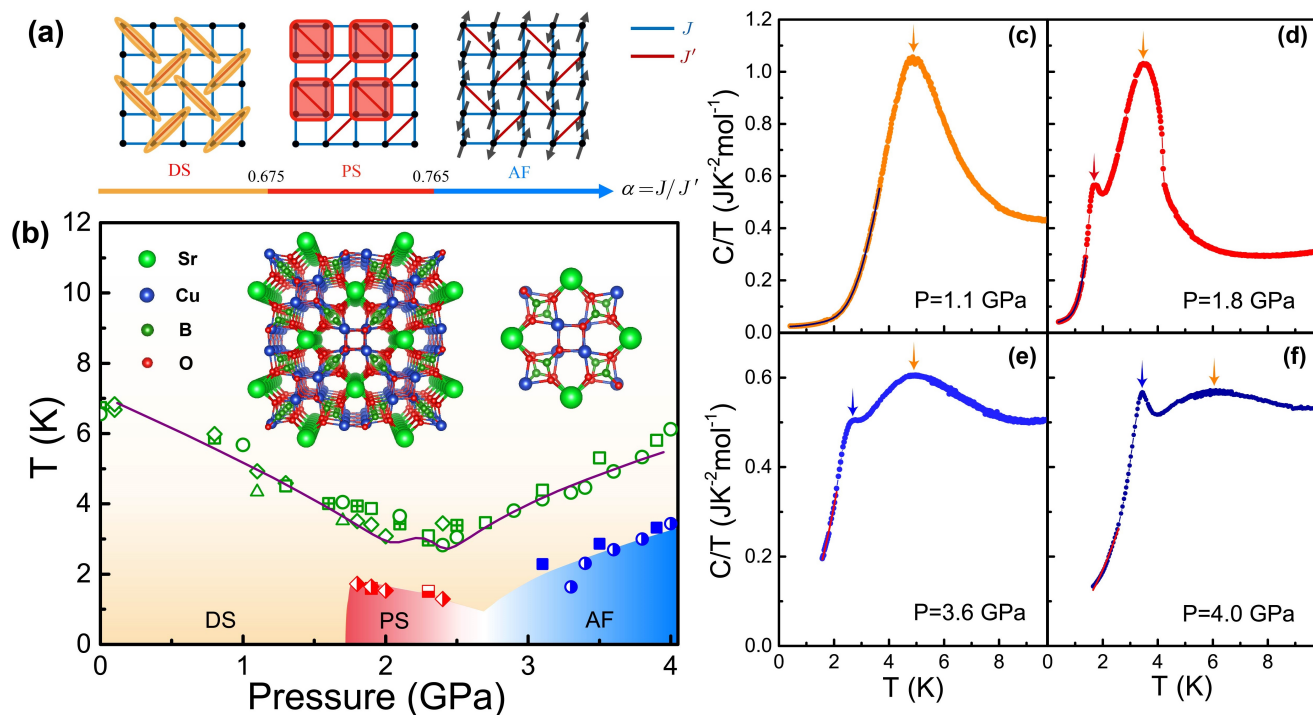


Рис. 1.5. На верхній лівій панелі наведена можливі фази в основному стані і фазова діаграма  $S = 1/2$  моделі Шастри-Сазерленда; на нижній лівій панелі наведена експериментальна фазова діаграма в площині температура–прикладений тиск. Праворуч наведено зміну температурної поведінки теплоємності для різних значень прикладеного тиску. Рисунок взято із [61].

ходом із димер-синглетної фази у плакет-синглетну фазу. Попри те, що модель містить трикутники, тобто «страждає» від «проблеми знаку» у методі квантового Монте Карло, вдається знайти димерний базис гамільтоніану, в якому проблема знаку зникає [63, 64]. В останніх експериментах із прикладенням зовнішнього тиску вдається змінювати співвідношення параметрів між взаємодією на квадратній гратці і на димерах. Це дозволяє експериментально спостерігати вплив фазового переходу в основному стані на низькотемпературну поведінку: із зміною тиску у низькотемпературній залежності теплоємності  $c(T)$  з'являється додатковий максимум, див. праву панель рис. 1.5.

Надійних універсальних аналітичних методів для дослідження геометрично фрустрованих спінових магнетиків немає. Аналізувати поведінку певних моделей можна із допомогою розкладів навколо класичного  $S \rightarrow \infty$  основного стану. Однією із добре вивчених таких систем є квантовий антиферромагнетик Гайзенберга на

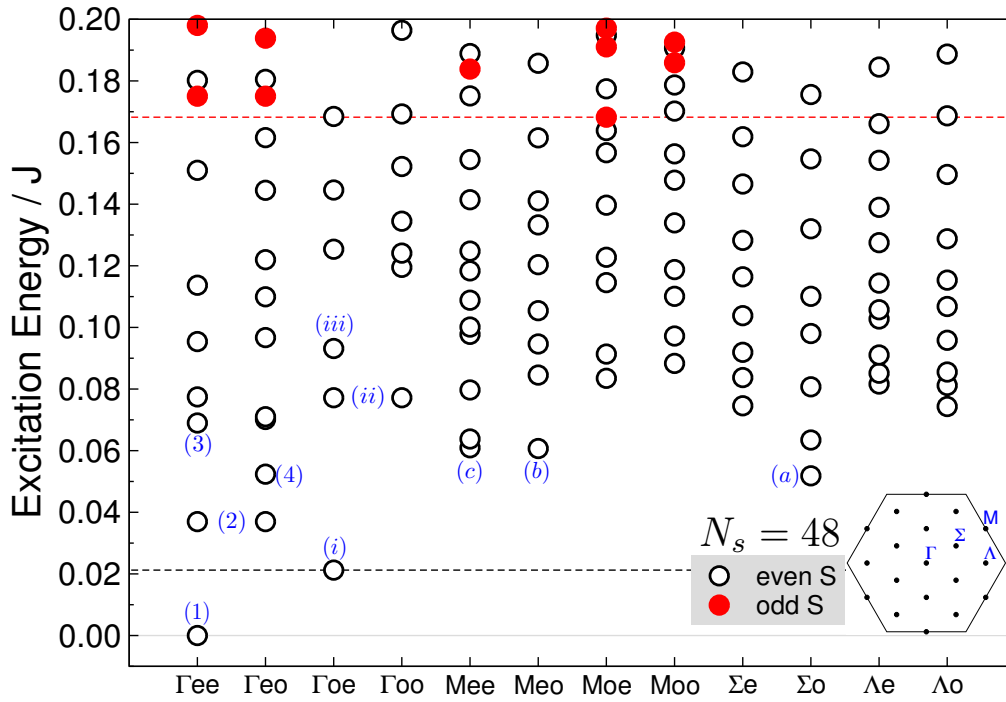


Рис. 1.6. Низькоенергетичний спектр  $S = 1/2$  квантового антиферромагнетика Гайзенберга на гратці кагоме для системи із  $N = 48$  спінів. Рисунок взято із [12].

гратці кагоме. Для цієї моделі побудована нелінійна теорія спінових хвиль [48]. Але для більшості цікавих випадків навіть класичний основний стан моделі невідомий. Наприклад, для класичного  $S \rightarrow \infty$  антиферромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору вже у гармонічному наближенні різні початкові стани (бо основний стан є вироджений) приводять до різного значення енергії основного стану.

Значний прогрес у дослідженні одновимірних квантових систем вдалося досягнути симуляціями методом ренормалізаційної групи для матриці густини (DMRG). Згодом використання цього методу вдалося розширити на двовимірний випадок [13, 14]. Попри значне застосування методу при  $D = 2$  в останні роки [65], все ж існують певні обмеження і відкриті проблеми. Наприклад, відомо, що у більшості випадків DMRG дає результати із щільним спектром, навіть для систем, які не мають такої поведінки. Часто цю проблему вирішують специфічним вибором граничних умов скінченних кластерів [66]. Нещодавно цей метод було застосовано до тривимірної  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на гратці пірохлору [15, 16].

Найбільш прямим методом числових симуляцій спінових систем є метод повної точної діагоналізації. Із повним врахуванням всіх симетрій зараз найбільшою доступною системою є ґратка із  $N = 24$  вузлів. Збільшити розміри системи можна, застосувавши метод Ланцоша, див. огляд [9]. Наприклад, для ґратки кагоме найбільшим є кластер із  $N = 48$  вузлів (в основному стані [12]) і  $N = 42$  вузлів (для повної діагоналізації при скінченних температурах [11]). Такі розміри систем недостатні для достовірного аналізу термодинамічних спостережуваних спінових систем, особливо у тривимірному просторі.

Арсенал методів дослідження термодинаміки фрустрованих систем обмежений. При скінченних температурах термодинаміку і динаміку фрустрованих систем можна досліджувати з допомогою ротаційно-інваріантних двочасових функцій Гріна (метод двочасових функцій Гріна у наближенні розщеплення Кондо-Ямаджі). Спочатку цей метод був запропонований для опису одновимірного  $S = 1/2$  ланцюжка Гайзенберга [67], де найпростіше наближення хаотичних фаз (бо наближення Тяблікова незастосовне). Тут в рівняннях руху відразу покладають  $\langle S^z \rangle = 0$  (що і забезпечує сферичну симетрію у спіновому просторі). Згодом наближення адаптували для моделей Гайзенберга на геометрично фрустрованих ґратках і для довільних значень спіну  $S \geq 1/2$  [68–77]. Протягом останніх років цей підхід застосували для дослідження термодинаміки антиферромагнітної спіну  $S$  моделі Гайзенберга на ґратках кагоме [78] і пірохлору [79]. Попри свою універсальність, отримані результати точні тільки при високих температурах, однак при проміжних і низьких температурах передбачення методу не завжди надійні.

Інший підхід із використанням функцій Гріна пов'язаний із ферміонізацією моделі Гайзенберга. Одним із таких методів є діаграматичне Монте Карло [80–82], з допомогою якого можна обчислити кореляційні функції моделі до відносно низьких температур. Наприклад, для  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на трикутній ґратці обчислена магнітна сприйнятливість до температур  $T \sim 0.4$  [80, 81], а для ґратки пірохлору до температур  $T \sim 1/6$  [82] (в одиницях обмінної взаємодії). Ще один шлях досліджувати термодинаміку фрустрованих систем — функціональна ренормалізаційна група для псевдомайоранових ферміонів [83]. Однак, цей нещодавно



давно запропонований метод ще недостатньо апробований.

У дисертаційній роботі ми досліджуватимемо термодинамічну поведінку двох типів фрустрованих систем: одновимірних декорованих (фрустрованих) моделей Ізинга (розділ 2) і термодинамічну поведінку квантової  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на тривимірній ґратці пірохлору (розділ 3). У першому випадку фрустрація декорації приводить до виникнення низькотемпературних особливостей декорованих драбинок і ланцюжків. Причину виникнення цієї поведінки пояснено на мові ефективних гамільтоніанів із залежними від температури параметрами. Для дослідження впливу геометричної фрустрації при скінченних температурах розглядалась квантова  $S = 1/2$  модель Гайзенберга на ґратці пірохлору (найфрустрованішій ґратці у тривимірному просторі) з феромагнітними і антиферомагнітними взаємодіями.

Ми покажемо, що фрустрації у класичних і класично-квантових системах можуть спричиняти явище псевдопереходу [32, 33]. У тривимірній  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга із феромагнітними взаємодіями вони ведуть до помітного зменшення температури Кюрі [30], а у випадку антиферомагнітних взаємодій приводять до характерних профілів у температурних залежностях теплоємності чи сприйнятливості [31].



## РОЗДІЛ 2

# ПСЕВДОПЕРЕХОДИ В ОДНОВИМІРНИХ КЛАСИЧНИХ І КЛАСИЧНО-КВАНТОВИХ СПІНОВИХ СИСТЕМАХ

### 2.1. Вступ: декоровані моделі Ізинга

Після того, як Ларс Онзагер знайшов точний розв'язок для моделі Ізинга на квадратній ґратці в нульовому полі [84], почалось інтенсивне дослідження двовимірних моделей Ізинга на різноманітних ґратках. Зокрема, точні розв'язки були знайдені для трикутної [35] і шестикутної [85] ґраток. Саме так вперше помітили, що термодинамічні властивості магнітних систем на геометрично фрустрованих ґратках відрізняються від таких властивостей на звичайних подвійних ґратках. Грегорі Ваньє розглянув модель Ізинга на трикутній ґратці і виявив, що на відміну від феромагнітного випадку, в антиферомагнітній моделі немає фазового переходу [35]. До того ж, основний стан антиферомагнітної моделі Ізинга на трикутній ґратці макроскопічно вироджений (тобто, кратність виродження росте за експонентою з ростом розмірів системи), що приводить до ненульового значення ентропії на вузол при  $T = 0$ .

Іншим класом точно розв'язних моделей є так звані декоровані моделі Ізинга. Декорована модель Ізинга — це модель Ізинга, де на кожному зв'язку вихідної (недекорованої) ґратки розміщений додатковий спін, чи декілька спінів. Вперше таку модель розглянув Ітіро Сіозі [36]. За допомогою декораційно-ітераційного перетворення і перетворення зірка-трикутник (див. рис. 2.1) він пов'язав статистичну суму декорованої шестикутної ґратки із статистичною сумою ґратки кагоме. Згодом Майкл Фішер узагальнив декораційно-ітераційне перетворення на випа-

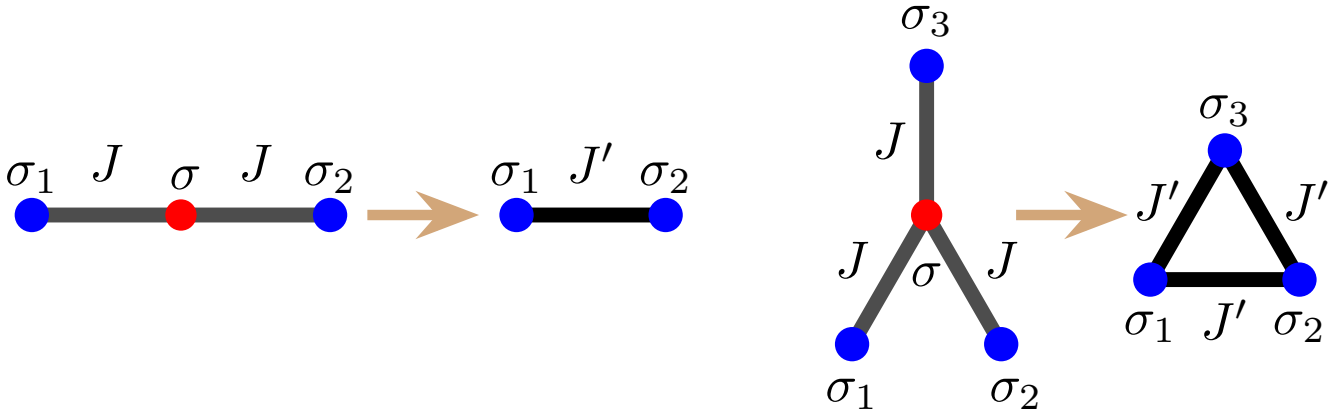


Рис. 2.1. Ілюстрація декораційно-ітераційного перетворення (ліворуч): просумувавши за станами спіну  $\sigma$ , приходимо до ефективної взаємодії між спінами  $\sigma_1$  і  $\sigma_2$ . Ілюстрація перетворення зірка-трикутник (праворуч): просумувавши за станами спіну  $\sigma$  (який взаємодіє з  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $\sigma_3$ ), приходимо до ефективної взаємодії спінів  $\sigma_1$ ,  $\sigma_2$ ,  $\sigma_3$  на трикутнику.

док, коли декорація — довільна скінченна статистична система [86] (деталі див. у низці праць [17, 87–89]). В цьому випадку на кожному із зв'язків недекорованої ґратки розміщена довільна система, енергетичні рівні якої можна знайти аналітично (див. ліва панель на рис. 2.2). Статистична сума декорованої моделі пов'язана із статистичною сумою вихідної моделі певним залежним від температури множителем і ренормалізацією обмінних взаємодій і полів. Декорація двовимірних моделей може приводити до багатьох несподіваних ефектів у термодинамічній поведінці, наприклад, до появи більш ніж однієї критичної температури [17]. Також такі моделі можуть бути доречними для опису експериментальних даних, наприклад, для сполук з ураном [90, 91].

Ефективні одновимірні ланцюжки Ізинга можуть природньо виникати в моделях, де є певне періодичне одновимірне розташування довільних скінченних дворівневих чи багаторівневих статистичних систем, взаємодію яких між собою можна привести до обмінної взаємодії Ізинга. Серед таких прикладів: періодична одновимірна система частинок із м'яким відштовхувальним потенціалом, для якої при достатньо низьких температурах існує відображення на ефективний одновимірний ланцюжок Ізинга із взаємодією, яка залежить від температури [94]; молекулярні ланцюжки із виродженими станами і фононою взаємодією (приклад

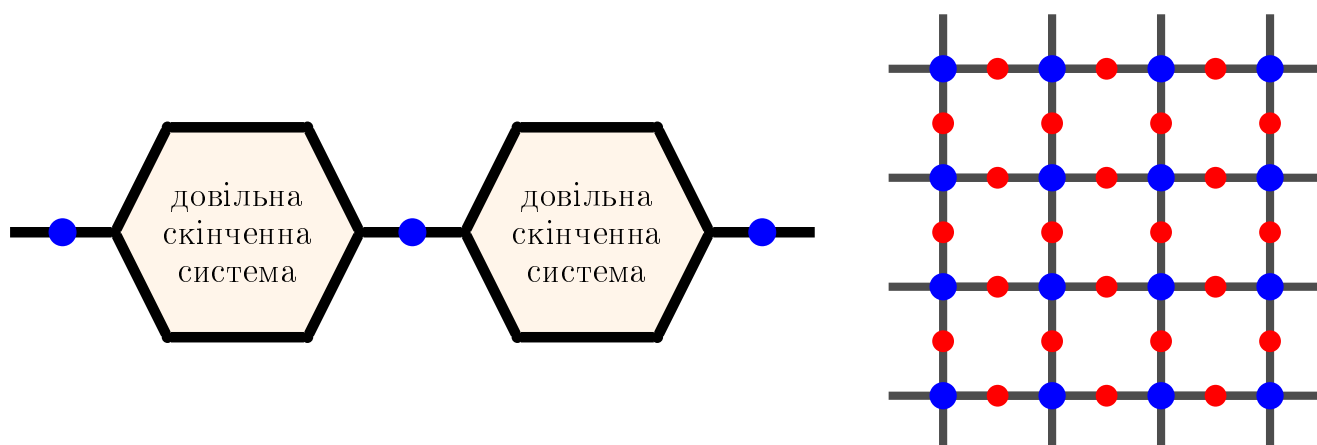


Рис. 2.2. Приклади декорованих систем Ізинга. Ліва панель: одновимірний ланцюжок Ізинга, декорований довільною скінченною статистичною системою із відомими енергетичними рівнями. Права панель: квадратна ґратка, зв'язки якої декоровані спінами Ізинга з довільною величиною спіну, вперше запропонована як проста модель феррімагнетика [92] (тепер також відома і як ґратка Ліба [93]).

так званих кросоверних матеріалів), де стани із високим і низьким спіном вдається змоделювати спінами Ізинга, а параметри гамільтоніану моделі — залежні від температури [95, 96] та інші.

Хоча, взагалі кажучи, роль декорації може відігравати довільна скінченна система із відомими енергетичними рівнями, найбільш дослідженими є так звані моделі Ізинга-Гайзенберга. У цьому випадку роль декорації відіграє певний скінченний кластер квантових спінів Гайзенберга, з'єднаних між собою взаємодією Ізинга. Такі моделі успішно використовують для побудови термодинамічної теорії збурень [22, 97–99], дослідження магнетоелектричних ефектів [100], ефектів квантової запутаності [25, 101] і т.д. Такі системи можуть бути теоретичною моделлю для певного класу реальних магнітних сполук. Прикладом таких матеріалів є полімерні ланцюжки  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  [21, 22] і  $[\text{DyCuMoCu}]_\infty$  [23] (див. рис. 2.3) і молекулярне кільце  $\text{Dy}_4\text{Cr}_4$  (для довільних магнітних полів) [23]. Магнітні йони диспрозійу  $\text{Dy}^{3+}$  тут добре описуються Ізинговими спінами, а магнітні йони купруму  $\text{Cu}^{2+}$  — Гайзенберговими спінами.

Протягом останніх років проводилися дослідження різного типу декорованих ланцюжків (див. обговорення і відповідні поклики у [24, 88]). Однак, лише у

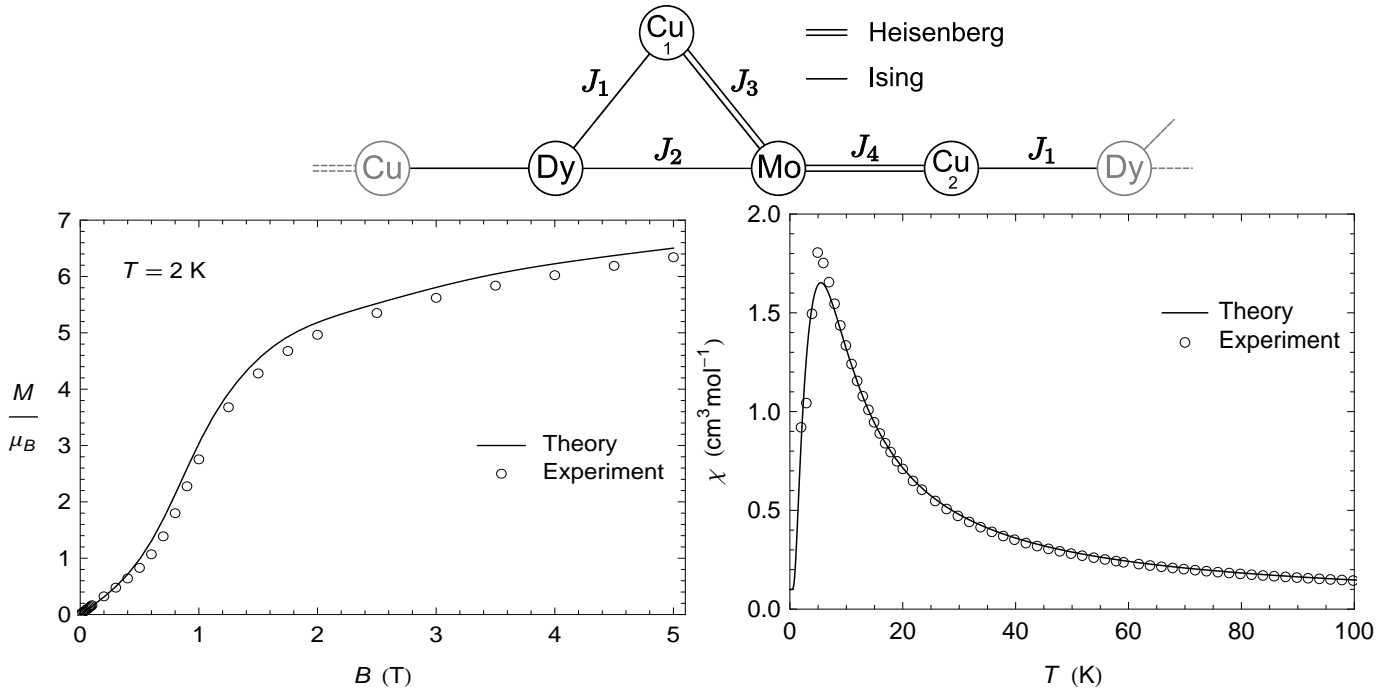


Рис. 2.3. Схематичне зображення елементарної комірки  $[\text{DyCuMoCu}]_\infty$ . Роль спінів Ізинга тут відіграють йони  $\text{Dy}^{3+}$ , декоровані тримером Гайзенберга  $[\text{CuMoCu}]$  (подвійні лінії). На нижніх панелях наведено порівняння експериментальних даних намагніченості і магнітної сприйнятливості із теорією. Рисунок взятий із [23].

2015 році вперше помітили [20], що для спін-електронного ланцюжка подвійних тетредрів при спеціальному наборі параметрів моделі спостерігається незвична поведінка термодинамічних величин при низьких температурах. Перші похідні від вільної енергії, наприклад, ентропія, при певному скінченному значенні температури мають стрибкоподібну поведінку, яка нагадує фазовий перехід першого роду. А теплоємність при цьому ж значенні температури має гострий високий, але скінченний пік. Хоча в обох випадках вільна енергія і її похідні залишаються аналітичними функціями температури. Згодом такі ж особливості були знайдені і для спін- $1/2$  Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка [102], де таку поведінку термодинамічних величин назвали псевдопереходом <sup>1</sup>, а температуру, при якій спостерігаються ці ефекти — псевдотемпературою  $T_p$ . Гострий пік для теплоєм-

<sup>1</sup>Термін псевдоперехід вживається в декількох статтях [103–105]. Зокрема П. Н. Тімонін [103] розглядав модель спінового льоду у магнітному полі на ґратці пірохлору, де псевдоперехід відбувався між спіновою рідиною (при низьких температурах) і парамагнітною фазою (при високих температурах). У моделях, які будемо надалі розглядати, псевдоперехід відбувається у парамагнітній фазі. Можливо, запропонований термін не дуже вдалий, але вже усталений у літературі.

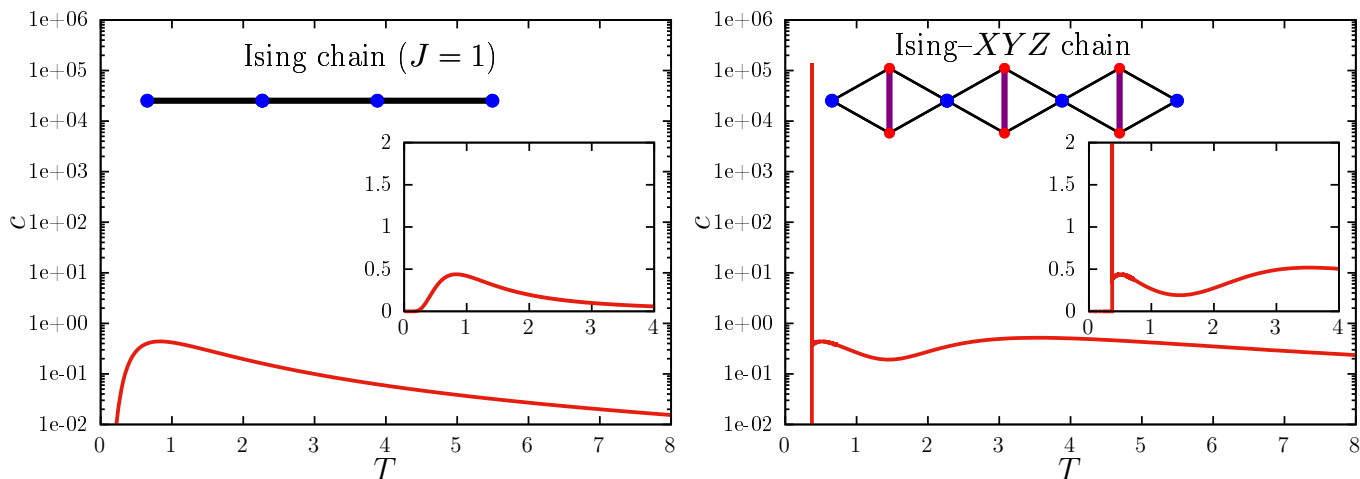


Рис. 2.4. Теплоємність спін-1/2 ланцюжка Ізинга при  $J = 1$  (ліворуч) і декорованого ланцюжка Ізинга (Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка) при певному специфічному наборі параметрів [24] (праворуч). Теплоємність (а також кореляційна довжина) цього спін-1/2 Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка сягає  $\approx 10^6$  при скінченній температурі  $T_p = 0.3726\dots$  [24].

ності (висота якого може сягати  $10^6$ , див. рис. 2.4) супроводжується аномально великими значеннями кореляційної довжини [18]. У статті [24] автори виявили, що для певного класу одновимірних декорованих моделей (не тільки для простих ланцюжків) низькотемпературні особливості супроводжуються степеневою поведінкою поблизу  $T_p$  (але не при  $T = T_p$ ) із псевдокритичними показниками  $\nu = \nu' = 1$ ,  $\alpha = \alpha' = \gamma = \gamma' = 3$ , які суперечать відомим співвідношенням скейлінгу  $\alpha + 2\beta + \gamma = 2$ . Ця поведінка спостерігається не тільки для моделей із спеціальним типом квантових декорацій, а також і для цілком класичних моделей Ізинга на ромбічному ланцюжку [106] і різноманітних драбинках Ізинга [26, 27].

У цьому розділі ми розглянемо деякі з вищезгаданих прикладів декорованих моделей із псевдопереходом і з'ясуємо природу цих особливостей. Ми пропонуємо аналізувати Ізинговий гамільтоніан, який виникає після «виключення» декорації. Низькотемпературні термодинамічні особливості пов'язані із температурною залежністю ефективних параметрів моделі, а квазікритична поведінка з тим, що деякі з цих параметрів змінюють знак при  $T = T_p$ , коли температура росте/спадає. Структура розділу наступна. У підрозділі 2.2 розглянемо модель Ізинга на двоногій драбинці із тримерними щаблями, у підрозділі 2.3 розгляне-

мо декілька декорованих ланцюжків, в основному зосередивши увагу на спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічному ланцюжку. Завершимо розділ висновками у підрозділі 2.4. Результати, представлені у цьому розділі, опубліковано у двох статтях [32, 33].

## 2.2. Двонога драбинка Ізинга з декорованими щаблями

Розгляньмо найпростіший випадок декорованої двоногій драбинки Ізинга із тримерними щаблями [26] (див. верхню частину рис. 2.5), гамільтоніан якої має вигляд

$$\mathcal{H} = - \sum_{i=1}^N [J(\sigma_{i,1}\sigma_{i+1,1} + \sigma_{i,2}\sigma_{i+1,2}) + J_1(\sigma_{i,1}\sigma_{i,3} + \sigma_{i,2}\sigma_{i,3}) + J_2\sigma_{i,1}\sigma_{i,2}], \quad (2.1)$$

де Ізинговий спіні  $\sigma = \pm 1$ ,  $N$  — кількість щаблів, а додатне/від'ємне значення обмінних взаємодій Ізинга відповідає феромагнітному/антиферомагнітному зв'язку.

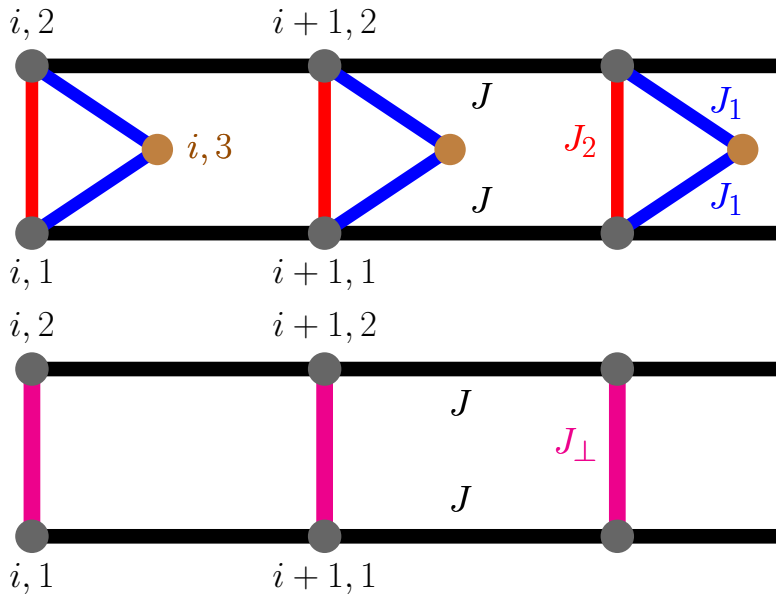


Рис. 2.5. Двонога драбинка Ізинга із тримерними щаблями (2.1) (зверху) і ефективна модель Ізинга на звичайній двоногій драбинці Ізинга із ефективною взаємодією на щаблях  $J_{\perp}(T)$  (2.3) (знизу).

У роботі [26] Вейґуо Їн виявив, що коли взаємодія на щаблях антиферомагнітна  $J_2 < 0$ , тоді при малих додатніх значеннях параметра фрустрації

$(|J_1| - |J_2|)/|J_1|$  і при достатньо низькому значенні температури ентропія змінюється стрибкоподібно, а теплоємність має дуже гострий скінченний пік. Це явище було назване граничним фазовим переходом [26, 27] або майже досконалим фазовим переходом [27] і детально досліджено у працях В. Їна 2020 р. [26, 27].

Для того, щоб пояснити несподівану низькотемпературну поведінку моделі (2.1), ми скористаємося запропонованим нами підходом [33], який базується на аналізі ефективного гамільтоніану і не залежить від вибору конкретної вихідної моделі. Щоб отримати ефективний гамільтоніан, застосуємо до початкової моделі (2.1) так зване декораційно-ітераційне перетворення [17, 36, 86–89]. У такий спосіб ми проведемо сумування за середніми спінами на тримерних щаблях  $\sigma_{i,3}$  (див. рис. 2.5). Для прикладу, зробимо відповідні перетворення у виразі для статистичної суми одного щабля:

$$\sum_{\{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\}} e^{-\beta \mathcal{H}} = \sum_{\{\sigma_1, \sigma_2\}} 2 \cosh(2\beta J_1(\sigma_1 + \sigma_2)) e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2)} = \sum_{\{\sigma_1, \sigma_2\}} C e^{-\beta J_\perp \sigma_1 \sigma_2} e^{-\beta \mathcal{H}(\sigma_1, \sigma_2)}; \quad (2.2)$$

тут  $\beta = 1/k_B T$ , де  $k_B$  — стала Больцмана (надалі всюди вважатимемо  $k_B = 1$ ), а  $T$  — температура. Невідомі  $C$  і  $J_\perp$  знайдемо з рівності  $2 \cosh(2\beta J_1(\sigma_1 + \sigma_2)) = C e^{-\beta J_\perp \sigma_1 \sigma_2}$ . Після цього можемо записати ефективний гамільтоніан для вихідної моделі драбинки Ізинга з тримерними щаблями (2.1) як гамільтоніан моделі Ізинга на звичайній двоногій драбинці із залежною від температури взаємодією на вертикальних щаблях  $J_\perp$  (див. нижню частину рис. 2.5):

$$\mathcal{H} = -NT \ln C - \sum_{i=1}^N [J(\sigma_{i,1}\sigma_{i+1,1} + \sigma_{i,2}\sigma_{i+1,2}) + J_\perp \sigma_{i,1}\sigma_{i,2}], \quad (2.3)$$

$$C = 2\sqrt{\cosh \frac{2J_1}{T}}, \quad J_\perp = J_\perp(T) = J_2 + \frac{T}{2} \ln \cosh \frac{2J_1}{T}.$$

Термодинаміку моделі (2.3) можна знайти методом матриці переносу [107] (втім, як і термодинаміку вихідної моделі [26, 27]). Для цього запишемо матрицю

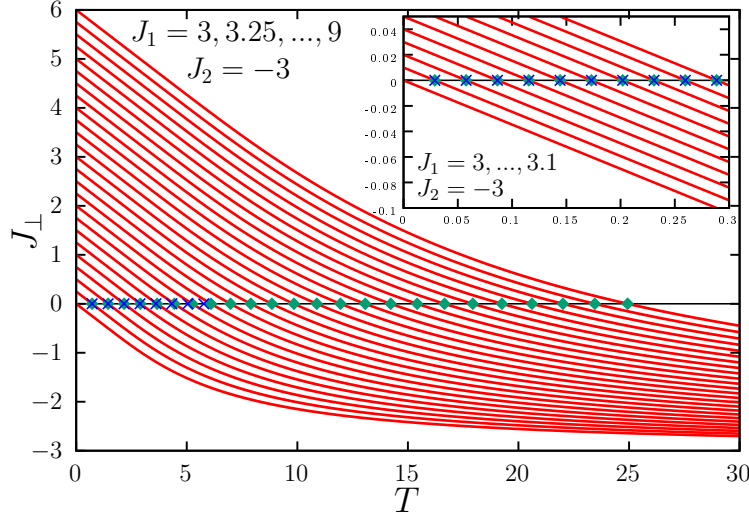


Рис. 2.6. Залежність взаємодії  $J_{\perp}$  (2.3) від температури  $T$  для набору параметрів  $J_1 = 3, 3.01, \dots, 3.1$  на вставці і для  $J_1 = 3, 3.25, \dots, 9$  на основному рисунку. Зелені ромби відповідають температурі  $T_p$ , а сині хрести — наближеному аналітичному розв'язку  $T_p = 2(|J_1| - |J_2|) / \ln 2$ , який годиться для випадку  $J_2 = -|J_2|$  і  $(|J_1| - |J_2|)/|J_1| \rightarrow +0$ .

переносу двоногї драбинки Ізинга

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} a^2b & 1 & 1 & a^{-2}b \\ 1 & a^2b^{-1} & a^{-2}b^{-1} & 1 \\ 1 & a^{-2}b^{-1} & a^2b^{-1} & 1 \\ a^{-2}b & 1 & 1 & a^2b \end{pmatrix}, \quad (2.4)$$

де  $a = e^{J/T}$ ,  $b = e^{J_{\perp}/T}$ .

Знайшовши власні значенні матриці переносу  $\mathbb{T}$

$$\begin{aligned} \lambda_{1,2} &= 2 \left( \cosh \frac{J_{\perp}}{T} \cosh \frac{2J}{T} \pm \sqrt{1 + \sinh^2 \frac{J_{\perp}}{T} \cosh^2 \frac{2J}{T}} \right), \\ \lambda_{3,4} &= 2 \cosh \frac{2J}{T} e^{\pm \frac{J_{\perp}}{T}}, \end{aligned} \quad (2.5)$$

можемо обчислити вільну енергію на щабель  $f$

$$f = -T \ln C - T \ln \lambda_1, \quad (2.6)$$

де  $\lambda_1$  — найбільше власне значення матриці (2.4). Як побачимо далі, причиною вищезгаданих низькотемпературних особливостей у термодинамічній поведінці моделі (2.3) є залежність від температури  $T$  взаємодії на щаблях  $J_{\perp} = J_{\perp}(T)$ , див.



рис. 2.6. Із врахуванням цього, запишемо вирази для внутрішньої енергії  $e$ , ентропії  $s$  і теплоємності  $c$ :

$$\begin{aligned}
e &= e^{(1)} + e^{(2)}, & e^{(1)} &= -T^2 \frac{\partial f}{\partial T T}, & e^{(2)} &= -T \frac{\partial f}{\partial J_{\perp}} J'_{\perp}; \\
s &= s^{(1)} + s^{(2)}, & s^{(1)} &= -\frac{\partial f}{\partial T}, & s^{(2)} &= -\frac{\partial f}{\partial J_{\perp}} J'_{\perp}; \\
c &= c^{(1)} + c^{(2)} + c^{(3)} + c^{(4)}, \\
c^{(1)} &= -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2}, & c^{(2)} &= -2T \frac{\partial^2 f}{\partial T \partial J_{\perp}} J'_{\perp}, & c^{(3)} &= -T \frac{\partial^2 f}{\partial J_{\perp}^2} (J'_{\perp})^2, & c^{(4)} &= -T \frac{\partial f}{\partial J_{\perp}} J''_{\perp}.
\end{aligned} \tag{2.7}$$

Тут похідні від вільної енергії за  $J_{\perp}$  згідно (2.6) мають вигляд:

$$\begin{aligned}
\frac{\partial f}{\partial J_{\perp}} &= -\frac{\sinh \frac{J_{\perp}}{T} \cosh \frac{2J}{T}}{\sqrt{1 + \sinh^2 \frac{J_{\perp}}{T} \cosh^2 \frac{2J}{T}}}, \\
\frac{\partial^2 f}{\partial J_{\perp}^2} &= -\frac{\cosh \frac{J_{\perp}}{T} \cosh \frac{2J}{T}}{T \left(1 + \sinh^2 \frac{J_{\perp}}{T} \cosh^2 \frac{2J}{T}\right)^{\frac{3}{2}}}, \\
\frac{\partial^2 f}{\partial T \partial J_{\perp}} &= \frac{J_{\perp} \cosh \frac{J_{\perp}}{T} \cosh \frac{2J}{T} + 2J \sinh \frac{J_{\perp}}{T} \sinh \frac{2J}{T}}{T^2 \left(1 + \sinh^2 \frac{J_{\perp}}{T} \cosh^2 \frac{2J}{T}\right)^{\frac{3}{2}}},
\end{aligned} \tag{2.8}$$

а штрихом і подвійним штрихом позначені перша і друга похідна за температурою від взаємодії на щаблях:  $J'_{\perp} = \partial J_{\perp} / \partial T$  і  $J''_{\perp} = \partial^2 J_{\perp} / \partial T^2$ .

Варто зазначити, що за означенням  $\partial f / \partial J_{\perp} = -\sum_{i=1}^N \langle \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \rangle / N = -C_{12}(0)$  є кореляційною функцією між двома спінами на вертикальному щаблі, див. сині овали на рис. 2.7. У праці [26] цю величину розглядали як аналог параметра порядку, оскільки при певному значенні температури  $C_{12}(0)$  стрибкоподібно (але все-таки неперервно) змінює значення від майже  $-1$  до майже  $1$  (див. на поведінку доданка  $s^{(2)} \propto \partial f / \partial J_{\perp}$ , який пропорційний  $C_{12}(0)$ , на вкладці лівої панелі рис. 2.8).

Розгляньмо кореляційну довжину  $\xi$ , пов'язану з двоточковою кореляційною

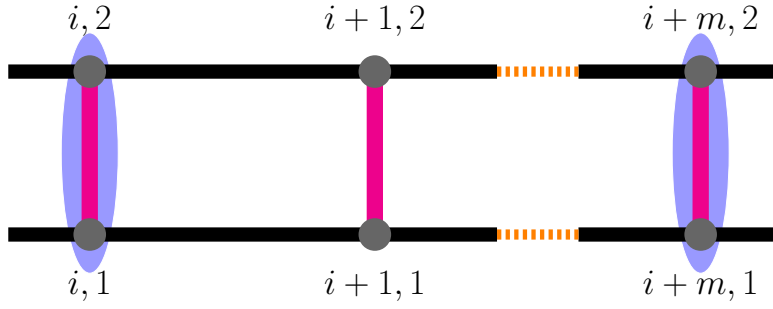


Рис. 2.7. Двоточкова кореляційна функція (2.9) між шаблями  $i$  та  $i + m$ .

функцією між шаблями  $i$  та  $i + m$   $\langle \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \sigma_{i+m,1} \sigma_{i+m,2} \rangle$  (див. рис. 2.7)

$$\langle \sigma_{i,1} \sigma_{i,2} \sigma_{i+m,1} \sigma_{i+m,2} \rangle = \exp(-m/\xi),$$

$$\xi^{-1} = \ln \frac{\lambda_1}{\lambda_2} = \ln \frac{\cosh \frac{J_{\perp}}{T} \cosh \frac{2J}{T} + \sqrt{1 + \sinh^2 \frac{J_{\perp}}{T} \cosh^2 \frac{2J}{T}}}{\cosh \frac{J_{\perp}}{T} \cosh \frac{2J}{T} - \sqrt{1 + \sinh^2 \frac{J_{\perp}}{T} \cosh^2 \frac{2J}{T}}}. \quad (2.9)$$

Надалі ми обговоримо температурну залежність цієї кореляційної довжини  $\xi(T)$ .

Отримані рівняння ефективного опису (2.3) – (2.9) дають змогу пояснити низькотемпературну поведінку вихідної моделі (2.1), яку спостерігав В. Їн [26]. Розгляньмо випадок, коли ефективна взаємодія на щаблі  $J_{\perp}$  (2.3) феромагнітна в діапазоні температур  $0 \leq T < T_p$ ,  $J_{\perp}(T_p) = 0$  при  $T = T_p$  і  $J_{\perp}$  стає антиферомагнітною при  $T > T_p$ . Тобто,  $J_{\perp}$  (2.3) змінює знак як функція  $T$ , а рівняння для температури  $T_p$  (температура псевдопереходу) виглядатиме так:

$$J_{\perp}(T_p) = 0. \quad (2.10)$$

Із точного виразу для  $J_{\perp}(T)$  (2.3) можна побачити, що дійсний розв'язок для  $T_p$  можливий тільки при  $J_2 < 0$ , тобто для випадку антиферомагнітної взаємодії, що і створює фрустрацію на тримері у вихідній моделі [26]. Аналітичний розв'язок трансцендентного рівняння (2.10) можна знайти у випадку  $(|J_1| - |J_2|)/|J_1| \rightarrow +0$ . А саме  $T_p = 2(|J_1| - |J_2|)/\ln 2 \approx 2.885(|J_1| - |J_2|)$ . Це значення температури відповідає температурі граничного фазового переходу [26]. При значенні температури  $T = T_p$  двонога драбинка розщеплюється на два ланцюжки Ізинга і кореляційна

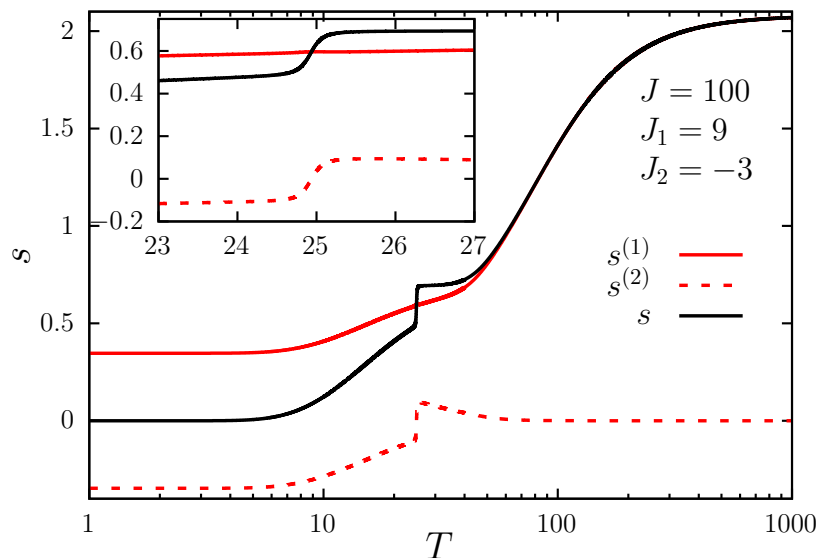


Рис. 2.8. Низькотемпературна залежність ентропії і вклади окремих доданків з (2.7) двоної драбинки з тримерними шаблями для набору параметрів  $J_1 = 9$ ,  $J_2 = -3$ ,  $J = 100$ . На вкладці відповідні величини також наведені поблизу псевдокритичної температури  $T_p \approx 24.937$ .

довжина (2.9) в цьому випадку

$$\xi(T_p)^{-1} = \ln \frac{\cosh \frac{2J}{T_p} + 1}{\cosh \frac{2J}{T_p} - 1}. \quad (2.11)$$

При достатньо малих значеннях  $T_p/J$  кореляційна довжина  $\xi(T_p)$  набуває дуже великих значень (при  $T_p/J \rightarrow 0$  кореляційна довжина розбігається:  $\xi(T_p) \rightarrow \infty$ ), і буде відповідати значенню  $\xi$  для звичайного ланцюжка Ізинга  $\xi(T_p) \propto \exp(2|J|/T_p)$  [107]. Отже, при  $T_p/|J| \ll 1$  ми будемо спостерігати для моделі (2.1) «залишки» критичної поведінки ланцюжка Ізинга. У випадку  $J_\perp(T_p) = 0$  для похідних легко знайти, що  $\partial f / \partial J_\perp = 0$  і  $\partial^2 f / \partial J_\perp^2 = -[\cosh(2J/T_p)]/T_p$ . Поблизу псевдокритичної температури  $T_p$  доданок  $c^{(3)}$  у (2.7) буде пропорційний  $c^{(3)} \propto \exp(2|J|/T_p)(J'_\perp)^2$ . Відповідно,  $c^{(3)}$  також набуватиме великих значень, якщо  $T_p/|J| \ll 1$  (щоправда, важливу роль відіграє і множник  $(J'_\perp)^2$ , який може «пригасити» вклад від  $\exp(2|J|/T_p)$  у  $c^{(3)}$ , див. рис. 2.9 і обговорення нижче).

Розгляньмо ілюстративний приклад із набором параметрів  $J_1 = 9$ ,  $J_2 = -3$ ,  $J = 100$ . У цьому випадку параметр фрустрації  $(|J_1| - |J_2|)/|J_1| = 0.06$ , а псевдокритична температура  $T_p \approx 24.937$  ( $T_p/|J| \approx 0.249$ ). Температурну залежність

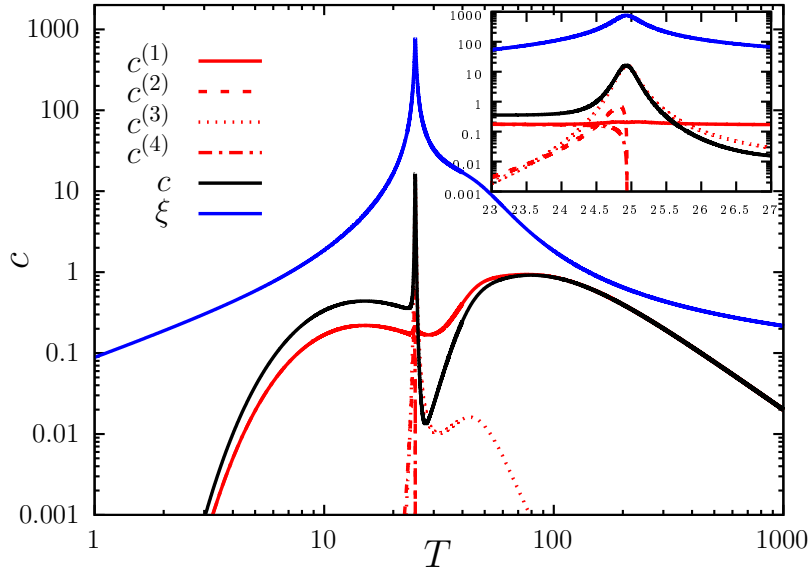


Рис. 2.9. Низькотемпературна залежність кореляційної довжини, теплоємності і вклад від окремих доданків з (2.7) двоногої драбинки з тримерними шаблонами для набору параметрів  $J_1 = 9$ ,  $J_2 = -3$ ,  $J = 100$ . На вкладці відповідні величини також наведені поблизу псевдокритичної температури  $T_p \approx 24.937$ .

$J_\perp(T)$  можна побачити на рис. 2.6. Залишаючись аналітичною функцією при  $T = T_p$ , ентропія змінюється стрибкоподібно завдяки доданку  $s^{(2)} = -(\partial f / \partial J_\perp) J'_\perp$  (див. рис. 2.8). Це пов'язано з тим, що поблизу псевдокритичної температури (але не у  $T = T_p$ )  $\partial f / \partial J_\perp \approx -\text{sgn}(J_\perp)$ . Теплоємність  $c$  має пік поблизу  $T_p$  завдяки вкладу від доданка  $c^{(3)} = -T(\partial^2 f / \partial J_\perp^2)(J'_\perp)^2$ :  $c(T_p) \approx 16.3$  (див. чорну криву на рис. 2.9). Кореляційна довжина  $\xi$  також має пік при  $T = T_p$ :  $\xi(T_p) \approx 760$  (див. синю криву на рис. 2.9). Оскільки для вибраного набору параметрів  $|J'_\perp(T_p)| < 1$ , значення теплоємності значно менше значення кореляційної довжини  $c(T_p) < \xi(T_p)$ .

Наостанок подивимось детальніше на термодинамічну поведінку поблизу псевдокритичної температури  $T_p$ , коли виконується нерівність

$$\sinh^2(J_\perp/T) \cosh^2(2J/T) \gg 1. \quad (2.12)$$

З рівняння (2.9) бачимо, що  $\xi \propto |J_\perp|^{-1}$ . Тоді як функції з (2.8)  $\partial f / \partial J_\perp \approx -\text{sgn}(J_\perp)$ ,  $\partial^2 f / \partial T \partial J_\perp \propto \text{sgn}(J_\perp) |J_\perp|^{-2}$  і  $\partial^2 f / \partial J_\perp^2 \propto |J_\perp|^{-3}$ . В околі  $T = T_p$  маємо

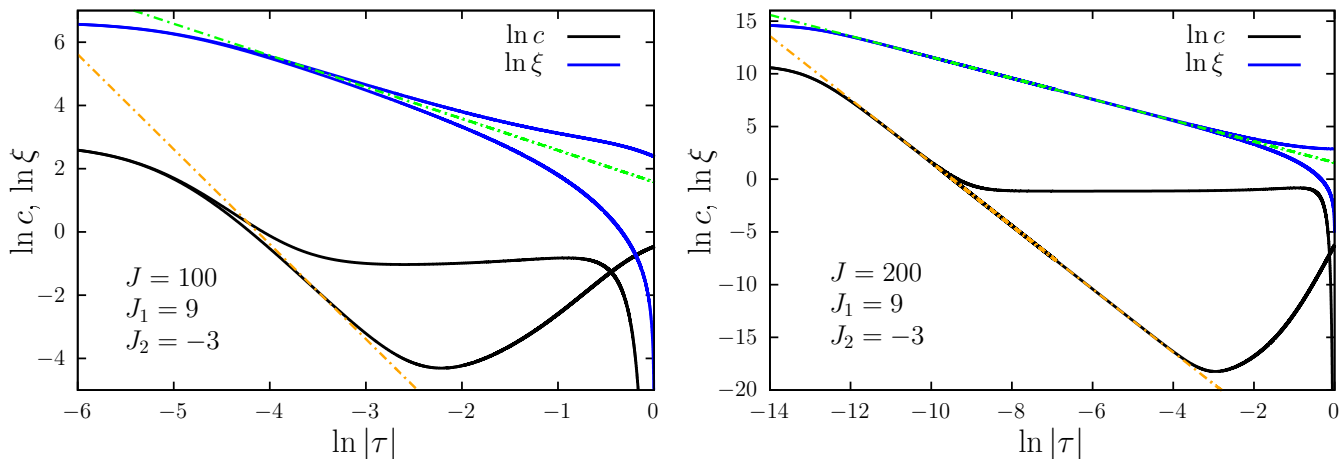


Рис. 2.10. Квазікритичні показники для теплоємності  $c$  і кореляційної довжини  $\xi$  як функції  $\ln |\tau|$ ,  $\tau = (T - T^*)/T^*$ , (де  $T^*$  температура, при якій теплоємність  $T_c$  або сприйнятливість  $T_\xi$  мають пік), для набору параметрів  $J_1 = 9$ ,  $J_2 = -3$  ( $T_p \approx 24.937$ ). Зліва:  $J = 100$ ,  $T_c = 24.927$  ( $c(T_c) \approx 16.4$ ),  $T_\xi = 24.929$  ( $\xi(T_p) \approx 7.61 \cdot 10^2$ ). Справа:  $J = 200$ ,  $T_c = 24.937$  ( $c(T_c) \approx 4.88 \cdot 10^4$ ),  $T_\xi = 24.929$  ( $\xi(T_p) \approx 2.31 \cdot 10^6$ ). Штрихові лінії відповідають квазікритичним експонентам  $\alpha = 3$  (оранжеві криві) і  $\nu = 1$  (зелені криві).

$J_\perp \propto T - T_p$  (див. рис. 2.6), а тому одразу бачимо, що кореляційна довжина

$$\xi \propto |T - T_p|^{-1}, \quad (2.13)$$

а теплоємність

$$c \propto |T - T_p|^{-3}. \quad (2.14)$$

На рис. 2.10 проілюстрована квазікритична поведінка моделі (2.1) для двох прикладів:  $J = 100$ ,  $J_1 = 9$ ,  $J_2 = -3$  із  $T_p/|J| \approx 0.249$  (ліворуч), а також для набору параметрів із вдвічі меншим значенням  $T_p/|J|$ :  $J = 200$ ,  $J_1 = 9$ ,  $J_2 = -3$ ,  $T_p/|J| \approx 0.125$  (праворуч). На певному скінченному інтервалі температур поблизу  $T = T_p$  кореляційна довжина  $\xi$  і теплоємність  $c$  виявляють степеневу поведінку  $\xi \propto |\tau|^{-\nu}$  і  $c \propto |\tau|^{-\alpha}$  з  $\nu = 1$  і  $\alpha = 3$ . Цей інтервал степеневі поведінки збільшується із зменшенням  $T_p/|J|$ . При  $T = T_p$  узгодження із степеневою поведінкою зникає (див. поведінку  $c$  і  $\xi$  для найменших значень  $\tau$  на рис. 2.10 —  $\xi$  і  $c$  є скінченні при  $T = T_p$ ). Тому подібно до теорії критичних явищ, можна ввести так

звані квазікритичні експоненти [24]  $\nu = \nu' = 1$  і  $\alpha = \alpha' = 3$ , які не задовольняють відоме скейлінгове співвідношення  $\alpha + D\nu = 2$ ,  $D = 1$  [107], що справедливе для справжніх фазових переходів.

Таким чином, у цьому підрозділі ми з'ясували причину незвичної низькотемпературної термодинамічної поведінки двонової драбинки Ізинга із тримерними шаблями, розглядаючи ефективний гамільтоніан драбинки Ізинга із ренормалізованою взаємодією на вертикальних шаблях. Низькотемпературні особливості цієї моделі пов'язані із температурною залежністю ефективної взаємодії на шаблях  $J_{\perp}(T)$ . Було показано, що при певному значенні температури  $T = T_p$  взаємодія  $J_{\perp}(T_p) = 0$ , тобто вихідна драбинка «розщеплюється» на два незалежні ланцюжки Ізинга. Якщо  $T_p/|J|$  є малим, то при цьому значенні температури спостерігатимуться «залишки» критичної поведінки ланцюжка Ізинга. Саме тому у температурному профілі кореляційної довжини і теплоємності спостерігається гострий скінченний пік, а ентропія чи внутрішня енергія має стрибкоподібну поведінку. Було також проаналізовано квазікритичну поведінку моделі поблизу псевдокритичної температури  $T = T_p$  і пояснено звідки виникають незвичні значення показників  $\nu = \nu' = 1$  і  $\alpha = \alpha' = 3$ . Результати, представлені у цьому підрозділі, опубліковано у статті [32].

### 2.3. Ланцюжок Ізинга з квантовими декораціями

В цьому підрозділі ми розглянемо три декоровані ланцюжки Ізинга: спін- $1/2$  Ізинг-XYZ ромбічний ланцюжок, спін-електронний ланцюжок подвійних тетраедрів і спін- $1/2$  Ізинг-Гайзенберг ланцюжок подвійних тетраедрів. Для кожної моделі загальний гамільтоніан можна записати як суму доданків, які комутують між собою  $\mathcal{H} = \sum_i \mathcal{H}_i$ ,  $[\mathcal{H}_i, \mathcal{H}_j] = 0$ . Отже, після декораційно-ітераційного перетворення [17, 36, 86–89] ефективний гамільтоніан для декорованих ланцюжків матиме вигляд звичайного ланцюжка Ізинга в магнітному полі із взаємодією  $J_{\text{eff}}(T)$  і полем  $H_{\text{eff}}(T)$ , які залежать від температури.

Наведемо тепер вихідний гамільтоніан для кожної моделі і відповідні еле-

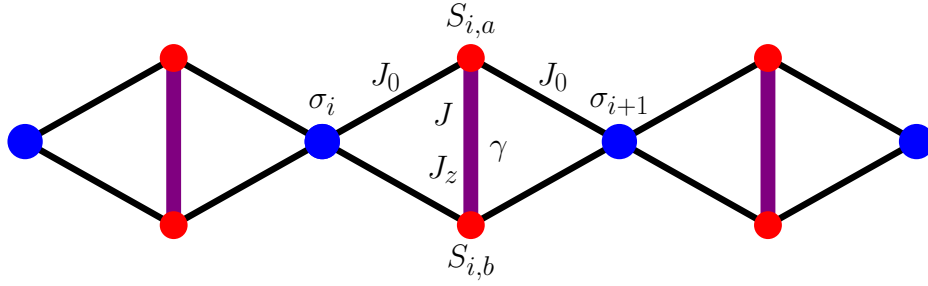


Рис. 2.11. Спін-1/2 Ізинг- $XYZ$  ромбічний ланцюжок (2.16) – (2.17). Спіни  $\sigma_i = \pm 1/2$  відповідають спінам Ізинга, спіни  $S_{i,a(b)}$  – це  $S = 1/2$  спіни Гайзенберга з  $XYZ$  взаємодією між собою ( $\gamma$  – параметр анізотропії,  $J$ ,  $J_z$  – обмінні взаємодії);  $J_0$  – взаємодія Ізинга між спінами  $\sigma$  і  $S_{a(b)}$ , а поля  $h$  і  $h_z$  напрямлені вздовж осі  $z$ .

менти матриці переносу  $\omega_\mu$ , ( $\mu = -1, 0, 1$ ). Для матриці переносу  $\mathbb{T}$  матимемо:

$$\mathbb{T} = \begin{pmatrix} \omega_1 & \omega_0 \\ \omega_0 & \omega_{-1} \end{pmatrix}. \quad (2.15)$$

Для спін-1/2 Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка [18, 102, 108] (див. рис. 2.11) маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i = & -J(1+\gamma)S_{a,i}^x S_{b,i}^x - J(1-\gamma)S_{a,i}^y S_{b,i}^y - J_z S_{a,i}^z S_{b,i}^z \\ & - J_0(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z)(\sigma_i + \sigma_{i+1}) - h_z(S_{a,i}^z + S_{b,i}^z) - \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}), \end{aligned} \quad (2.16)$$

$$\omega_\mu = 2e^{h\mu/2T} \left[ e^{-J_z/4T} \cosh \frac{J}{2T} + e^{J_z/4T} \cosh \frac{\Delta_\mu}{2T} \right], \quad \Delta_\mu = \sqrt{(h_z + J_0\mu)^2 + \frac{\gamma^2 J^2}{4}}. \quad (2.17)$$

Для спін-електронного ланцюжка подвійних тетраєдрів [20] (див. рис. 2.12) маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i = & -t \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \left( c_{i1,\alpha}^\dagger c_{i2,\alpha} + c_{i2,\alpha}^\dagger c_{i3,\alpha} + c_{i3,\alpha}^\dagger c_{i1,\alpha} + \text{h. c} \right) + U \sum_{j=1}^3 n_{ij,\uparrow} n_{ij,\downarrow} \\ & + \frac{J}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) \sum_{j=1}^3 (n_{ij,\uparrow} - n_{ij,\downarrow}) - \frac{h_I}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) - \frac{h_e}{2} \sum_{j=1}^3 (n_{ij,\uparrow} - n_{ij,\downarrow}), \end{aligned} \quad (2.18)$$

$$\begin{aligned} \omega_\mu = & e^{h_I/2T} \left[ (2e^{t/T} + e^{-2t/T}) \left( 1 + 2 \cosh \frac{J\mu - h_e}{T} \right) \right. \\ & \left. + 4e^{-(t+U)2T} \cosh \frac{\sqrt{(U-t)^2 + 8t^2}}{2T} + 2e^{(t-U)/2T} \cosh \frac{\sqrt{(U+2t)^2 + 32t^2}}{2T} \right]. \end{aligned} \quad (2.19)$$

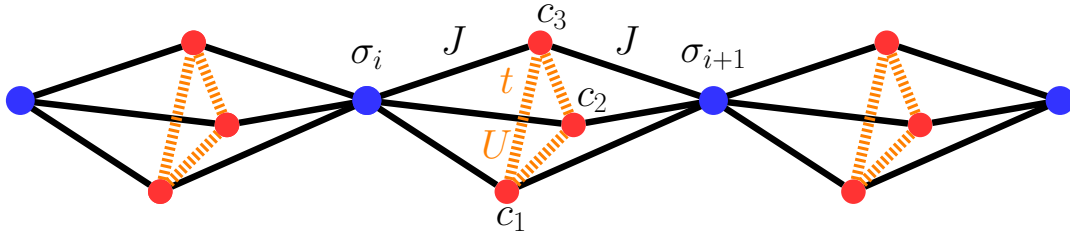


Рис. 2.12. Спін-електронний ланцюжок подвійних тетраедрів (2.18) – (2.19). Спіни  $\sigma = \pm 1/2$  відповідають спінам Ізинга, на кожній трикутній плакетці є два мобільні електрони із Кулоновим відштовхування  $U \geq 0$  на вузлі і параметром перестрибування  $t \geq 0$ ,  $J$  – взаємодія між спінами і електронами. Магнітні поля  $h_I$  і  $h_e$  відповідають за взаємодію спінів і електронів з магнітним полем (надалі вважатимемо  $h_I = h_e$ ).

Для спін-1/2 ланцюжка подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга [19] (див. рис. 2.13) маємо:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i = & -J(\mathbf{S}_{a,i} \cdot \mathbf{S}_{b,i})_z - J(\mathbf{S}_{b,i} \cdot \mathbf{S}_{c,i})_z - J(\mathbf{S}_{c,i} \cdot \mathbf{S}_{a,i})_z \\ & - \frac{h}{2}(\sigma_i + \sigma_{i+1}) - (S_{a,i}^z + S_{b,i}^z + S_{c,i}^z)[h_z + J_0(\sigma_i + \sigma_{i+1})], \end{aligned} \quad (2.20)$$

$$\omega_\mu = 2e^{(2h\mu - J_z)/4T} \left[ \left( e^{J/T} + 2e^{-J/2T} \cosh \frac{h_z + J_0\mu}{2T} \right) + e^{J_z/T} \cosh \frac{3(h_z + J_0\mu)}{2T} \right]. \quad (2.21)$$

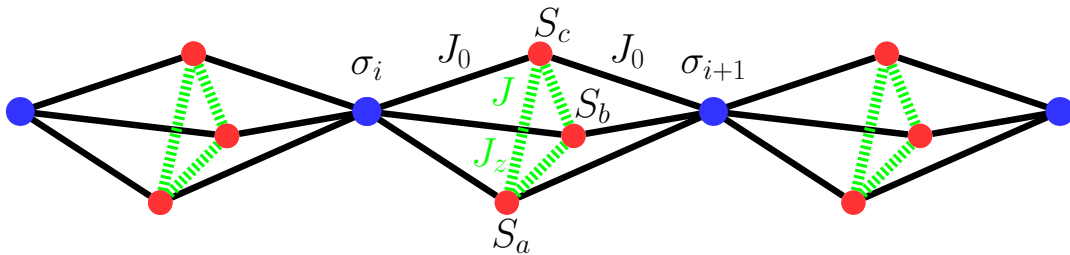


Рис. 2.13. Спін-1/2 Ізинг-Гайзенберг ланцюжок подвійних тетраедрів (2.20) – (2.21).  $\sigma = \pm 1/2$  – спіни Ізинга, спіни Гайзенберга між собою взаємодіють через  $XXZ$  взаємодію  $J(\mathbf{S}_{a,i} \cdot \mathbf{S}_{b,i}) = JS_{a,i}^x S_{b,i}^x + JS_{a,i}^y S_{b,i}^y + J_z S_{a,i}^z S_{b,i}^z$ .

Ефективний гамільтоніан для моделей (2.16), (2.18), (2.20) матиме вигляд:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{eff}} = & C - J_{\text{eff}} \sum_n S_n S_{n+1} - H_{\text{eff}} \sum_n S_n, \\ C = & -\mathcal{N} \frac{T}{4} \ln(\omega_1 \omega_0^2 \omega_{-1}), \quad J_{\text{eff}} = \frac{T}{4} \ln \frac{\omega_1 \omega_{-1}}{\omega_0^2}, \quad H_{\text{eff}} = \frac{T}{2} \ln \frac{\omega_1}{\omega_{-1}}, \end{aligned} \quad (2.22)$$



де  $\varsigma = \pm 1$ ,  $C(T)$ ,  $J_{\text{eff}}$ ,  $H_{\text{eff}}$  залежать від температури і відображають внутрішню структуру тієї чи іншої вихідної декорованої моделі. Взаємодія у (2.22) феромагнітна  $J_{\text{eff}} > 0$ , а ефективне магнітне поле  $H_{\text{eff}}$  змінює знак при скінченній температурі. У цьому випадку рівняння для псевдокритичної температури  $T_p$  має вигляд

$$H_{\text{eff}}(T_p) = 0. \quad (2.23)$$

Перейшовши до змінних

$$\frac{J_{\text{eff}}}{T} = \frac{J}{T}, \quad \frac{H_{\text{eff}}}{J_{\text{eff}}} = \frac{H}{J}, \quad (2.24)$$

розгляньмо звичайний феромагнітний ланцюжок Ізинга з гамільтоніаном

$$\mathcal{H}(\mathcal{N}, J, H) = -J \sum_n \sigma_n \sigma_{n+1} - H \sum_n \sigma_n, \quad J > 0. \quad (2.25)$$

Використовуючи співвідношення (2.24) побудуємо «траєкторії» кожної вихідної (декорованої) системи на  $H/J - T/J$  площині із ростом температури  $T$ . На рис. 2.14 зображено траєкторії для спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка, на рис. 2.15 — для спін-1/2 Ізинг-Гайзенберг ланцюжка подвійних тетраедрів, а на рис. 2.16 — для спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів. Розгляд «траєкторій» на  $H/J - T/J$  площині дозволяє порівнювати псевдокритичну поведінку різних моделей. До прикладу, для спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів рівняння для псевдокритичної температури (2.23) має два розв'язки (див. зелені ромби і незаповнені квадрати на рис. 2.16), але високотемпературний розв'язок не проявляє себе у спостережуваних величинах моделі (2.18). Для різних моделей бачимо різні температурні масштаби. Співвідношення  $T/J$  для XYZ ромбічного ланцюжка може бути як завгодно малим (рис. 2.14), тоді як для спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів воно не може бути меншим за  $T/J \approx 0.211$  (рис. 2.16). Як побачимо далі, важливу роль відіграє і нахил кривої при перетині прямої  $H = 0$ , тобто в точці псевдопереходу (порівняймо рис. 2.14 і рис. 2.16 чи рис. 2.15).

Термодинамічні властивості ефективної моделі (2.22) і відповідно вихідної

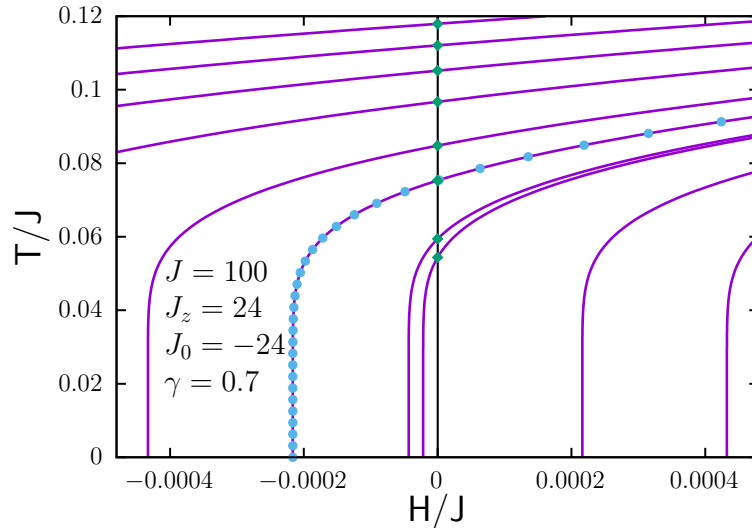


Рис. 2.14. Спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічний ланцюжок (2.16) на  $H/J - T/J$  площині для набору параметрів  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$ ,  $\gamma = 0.7$ . Фіолетові криві відповідають значенням  $h = 12.70, 12.71, 12.72, 12.73, 12.74, 12.745, 12.749, 12.7495, 12.755, 12.76$  (від правого верхнього до нижнього лівого кута); голубі диски відповідають точкам  $T = 0, 0.01, 0.02, \dots, 0.29$  при фіксованому значенні  $h = 12.745$ ; зелені ромби відповідають значенню псевдокритичної температури  $T_p$  (2.23) для значень  $h < 12.75$ .

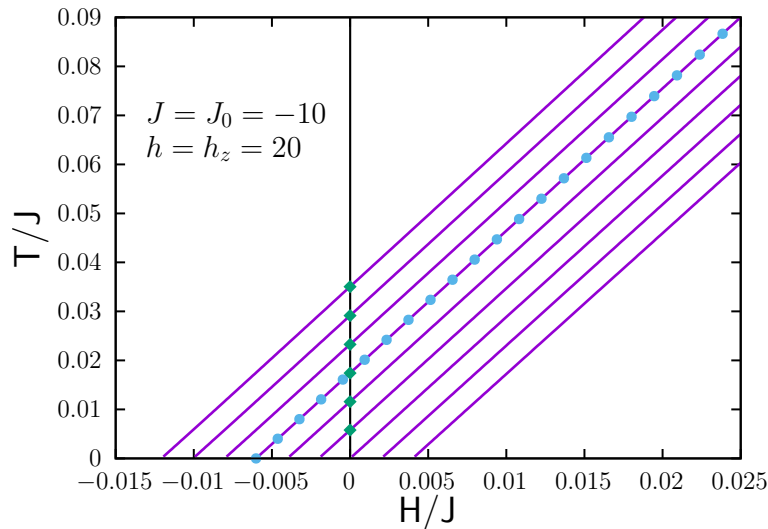


Рис. 2.15. Спін-1/2 ланцюжок подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга (2.20) на  $H/J - T/J$  площині для набору параметрів  $J = J_0 = -10$ ,  $h = h_z = 20$ . Фіолетові криві відповідають значенням  $J_z = -14.94, -14.95, -14.96, -14.97, -14.98, -14.99, -15.00, -15.01, -15.02$  (від верхнього лівого до нижнього правого кута); голубі диски відповідають точкам  $T = 0, 0.01, 0.02, \dots, 0.21$  при фіксованому значенні  $J_z = -14.97$ ; зелені ромби відповідають значенню псевдокритичної температури  $T_p$  (2.23) для значень  $J_z > -15.00$ .

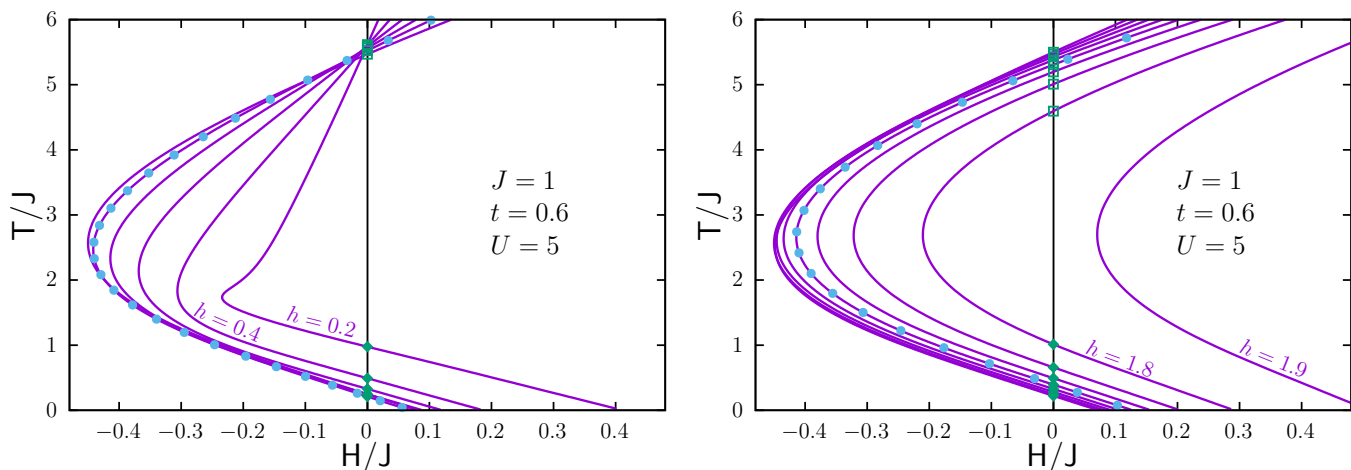


Рис. 2.16. Подвійно тетраедричний ланцюжок з локалізованими спінами і мобільними електронами (2.18) на  $H/J - T/J$  площині для набору параметрів  $J = 1$ ,  $t = 0.6$ ,  $U = 5$ . Фіолетові криві відповідають значенням  $h = 0.2, 0.4, 0.6, 0.8, 1, 1.2$  (ліва панель) і  $h = 1.1, 1.2, 1.3, 1.4, 1.5, 1.6, 1.7, 1.8, 1.9$  (права панель). Сині диски відповідають точкам  $T = 0.01, 0.035, 0.06, \dots, 0.285$  при фіксованому значенні  $h = 1$  (ліва панель) і  $h = 1.5$  (права панель), зелені ромби і пусті квадрати відповідають значенню псевдокритичної температури  $T_p$  (2.23) для значень  $h < 1.884$ .

декорованої моделі можна обчислити, знайшовши власні значення трансфер матриці ланцюжка Ізинга (2.25) [107]

$$\lambda_{\pm} = \exp \frac{J}{T} \left[ \cosh \frac{H}{T} \pm \sqrt{\sinh^2 \frac{H}{T} + \exp \left( -\frac{4J}{T} \right)} \right]. \quad (2.26)$$

Тоді вільна енергія на вузол

$$f = \frac{C}{\mathcal{N}} - T \ln \lambda_+, \quad (2.27)$$

а кореляційна довжина, що визначає згасання з відстанню двоточкової кореляційної функції  $\langle \sigma_i \sigma_{i+m} \rangle$ ,

$$\xi^{-1} = \ln \frac{\lambda_+}{\lambda_-}. \quad (2.28)$$

Обчисливши похідні за полем, отримаємо намагніченість  $m$  і магнітну сприйнятливість  $\chi$  спінів Ізинга

$$m = -\frac{\partial f}{\partial H_{\text{eff}}} = \frac{\sinh \frac{H_{\text{eff}}}{T}}{\sqrt{\sinh^2 \frac{H_{\text{eff}}}{T} + \exp \left( -\frac{4J_{\text{eff}}}{T} \right)}}, \quad (2.29)$$

$$\chi = \frac{\partial m}{\partial H_{\text{eff}}} = \frac{\cosh \frac{H_{\text{eff}}}{T} \exp\left(-\frac{4J_{\text{eff}}}{T}\right)}{\left[\sinh^2 \frac{H_{\text{eff}}}{T} + \exp\left(-\frac{4J_{\text{eff}}}{T}\right)\right]^{\frac{3}{2}}}. \quad (2.30)$$

Знайдемо тепер внутрішню енергію  $e$ , ентропію  $s$  і теплоємність  $c$ , враховуючи температурну залежність ефективної взаємодії  $J_{\text{eff}}(T)$  і ефективного поля  $H_{\text{eff}}(T)$ . Маємо

$$e = e^{(1)} + e^{(2)} + e^{(3)}, \quad e^{(1)} = -T^2 \frac{\partial f}{\partial T T}, \quad e^{(2)} = -T \frac{\partial f}{\partial J_{\text{eff}}} J'_{\text{eff}}, \quad e^{(3)} = T m H'_{\text{eff}} \quad (2.31)$$

для внутрішньої енергії,

$$s = s^{(1)} + s^{(2)} + s^{(3)}, \quad s^{(1)} = -\frac{\partial f}{\partial T}, \quad s^{(2)} = -\frac{\partial f}{\partial J_{\text{eff}}} J'_{\text{eff}}, \quad s^{(3)} = m H'_{\text{eff}} \quad (2.32)$$

для ентропії,

$$\begin{aligned} c &= \sum_{j=1}^8 c^{(j)}, \quad c^{(1)} = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2}, \quad c^{(2)} = -2T \frac{\partial^2 f}{\partial J_{\text{eff}} \partial T} J'_{\text{eff}}, \quad c^{(3)} = 2T \frac{\partial m}{\partial T} H'_{\text{eff}}, \\ c^{(4)} &= -T \frac{\partial^2 f}{\partial J_{\text{eff}}^2} (J'_{\text{eff}})^2, \quad c^{(5)} = 2T \frac{\partial m}{\partial J_{\text{eff}}} J'_{\text{eff}} H'_{\text{eff}}, \quad c^{(6)} = T \chi (H'_{\text{eff}})^2, \\ c^{(7)} &= -T \frac{\partial f}{\partial J_{\text{eff}}} J''_{\text{eff}}, \quad c^{(8)} = T m H''_{\text{eff}} \end{aligned} \quad (2.33)$$

для теплоємності. Тут ми ввели позначення, де верхні індекси у круглих дужках відповідають вкладу відповідних доданків у внутрішню енергію  $e$ , ентропію  $s$  і теплоємність  $c$ , а штрихи і подвійні штрихи відповідають першій і другій похідній за температурою  $T$  від ефективних параметрів моделі (2.22). Як бачимо, перші похідні від вільної енергії  $e$  і  $s$  містять доданки  $e^{(3)}$  і  $s^{(3)}$ , пропорційні намагніченості (2.29), а для теплоємності доданок  $c^{(6)}$  пропорційний сприйнятливості (2.30). Це наслідок того, що параметри  $J_{\text{eff}}$  і  $H_{\text{eff}}$  залежать від температури  $T$ .

Розгляньмо температурну залежність термодинамічних величин декорованих ланцюжків Ізинга на прикладі спінів-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка рис. 2.11. Ми зафіксуємо значення  $J = 100$ ,  $J_z = 24$ ,  $J_0 = -24$  і надалі будемо змінювати тільки  $\gamma$  і  $h$  (тут ми слідуємо вибору параметрів у працях [24, 102]).

Почнімо з кореляційної довжини

$$\xi^{-1} = \ln \frac{\cosh \frac{H_{\text{eff}}}{T} + \sqrt{\sinh^2 \frac{H_{\text{eff}}}{T} + \exp\left(-\frac{4J_{\text{eff}}}{T}\right)}}{\cosh \frac{H_{\text{eff}}}{T} - \sqrt{\sinh^2 \frac{H_{\text{eff}}}{T} + \exp\left(-\frac{4J_{\text{eff}}}{T}\right)}}. \quad (2.34)$$

При температурі псевдопереходу  $T_p$  рівняння (2.34) набуде вигляду

$$\xi^{-1}(T_p) = \ln \frac{1 + \exp\left(-\frac{2J_{\text{eff}}(T_p)}{T_p}\right)}{1 - \exp\left(-\frac{2J_{\text{eff}}(T_p)}{T_p}\right)}. \quad (2.35)$$

Лише у випадку  $2J_{\text{eff}}(T_p)/T_p \rightarrow \infty$  кореляційна довжина також прямує до безмежності  $\xi(T_p) \rightarrow \infty$ . Як і для випадку із декорованими драбинками, кореляційна довжина  $\xi$  набуватиме великих значень, якщо

$$\frac{2J_{\text{eff}}(T_p)}{T_p} \gg 1, \quad (2.36)$$

де псевдокритична температура  $T_p$  знаходиться з рівняння (2.23). З (2.36) випливає, що  $T/J \ll 2$  при  $T = T_p$ , тобто температура  $T$ , яка відповідає  $T_p$  є достатньо малою у порівнянні з  $J$ . У цьому наближенні ми можемо оцінити значення кореляційної довжини  $\xi(T_p)$ , яке завжди буде скінченним

$$\xi(T_p) \approx \frac{1}{2} \exp \frac{2J_{\text{eff}}(T_p)}{T_p} < \infty. \quad (2.37)$$

Однак поблизу температури  $T_p$  (але не для  $T = T_p$ ), коли виконується нерівність

$$\sinh^2 \frac{H_{\text{eff}}}{T} \gg \exp\left(-\frac{4J_{\text{eff}}}{T}\right), \quad (2.38)$$

рівняння (2.34) набуде вигляду

$$\xi^{-1} \approx \ln \frac{\cosh \frac{H_{\text{eff}}}{T} + \left| \sinh \frac{H_{\text{eff}}}{T} \right|}{\cosh \frac{H_{\text{eff}}}{T} - \left| \sinh \frac{H_{\text{eff}}}{T} \right|} \approx \frac{2H_{\text{eff}}}{T}, \quad (2.39)$$

що приводить до наступної поведінки поблизу  $T_p$

$$\xi|_{T \approx T_p} \propto \frac{1}{|H_{\text{eff}}(T)|}. \quad (2.40)$$

Магнітна сприйнятливості при  $T = T_p$  пропорційна кореляційній довжині

$$\chi(T_p) = \frac{1}{T_p} \exp \frac{2J_{\text{eff}}(T_p)}{T_p} \approx \frac{2\xi(T_p)}{T_p}, \quad (2.41)$$

а поблизу псевдопереходу

$$\chi|_{T \approx T_p} \approx \frac{1}{T} \frac{\cosh \frac{H_{\text{eff}}}{T}}{|\sinh \frac{H_{\text{eff}}}{T}|^3} \exp \left( -\frac{4J_{\text{eff}}}{T} \right) \approx \frac{1}{T} \left| \frac{T}{H_{\text{eff}}} \right|^3 \exp \left( -\frac{4J_{\text{eff}}}{T} \right) \propto \frac{1}{|H_{\text{eff}}|^3}. \quad (2.42)$$

Подивимось на температурну залежність кореляційної довжини  $\xi$ , магнітної сприйнятливості  $\chi$  і намагніченості  $m$  на  $H/J - T/J$  площині (див. рис. 2.14) і порівняємо її із поведінкою феромагнітного ланцюжка Ізинга (2.22). На лівій панелі рис. 2.17 наведено кореляційну довжину  $\xi(T)$  (сині криві) спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка для випадку, коли модель виявляє псевдоперехід. За температури  $T = T_p$  функція  $\xi$  досягає максимального значення. На рис. 2.18 наведено магнітну сприйнятливості  $\chi$  для такого ж набору параметрів як і для кореляційної довжини  $\xi$ .

Температурна залежність намагніченості  $m$  наведена на рис. 2.19. Із ростом температури  $T$  ефективне магнітне поле  $H_{\text{eff}}$  змінює знак при  $T = T_p$ , що приводить до зміни знаку намагніченості від майже  $-1$  до майже  $1$ . Ця стрибкоподібна поведінка (знову наголосимо, що  $m$  є неперервна функція при температурі  $T_p$ ) пов'язана із зміною знаку ефективного поля при низьких температурах. Така поведінка намагніченості відіграє важливу роль у поведінці ентропії і внутрішньої енергії (див. далі).

Температурну залежність внутрішньої енергії  $e$  і ентропії  $s$  можна зрозуміти із рівнянь (2.20) і (2.21) відповідно. На рис. 2.20 і рис. 2.21 наведено залежність  $e(T)$  і  $s(T)$  разом із вкладками від окремих доданків  $e^{(1)}(T)$ ,  $e^{(2)}(T)$ ,  $e^{(3)}(T)$  і  $s^{(1)}(T)$ ,  $s^{(2)}(T)$ ,  $s^{(3)}(T)$ . Звідси можна побачити, що стрибкоподібна поведінка обидвох термодинамічних величин (які є першими похідними від вільної енергії)

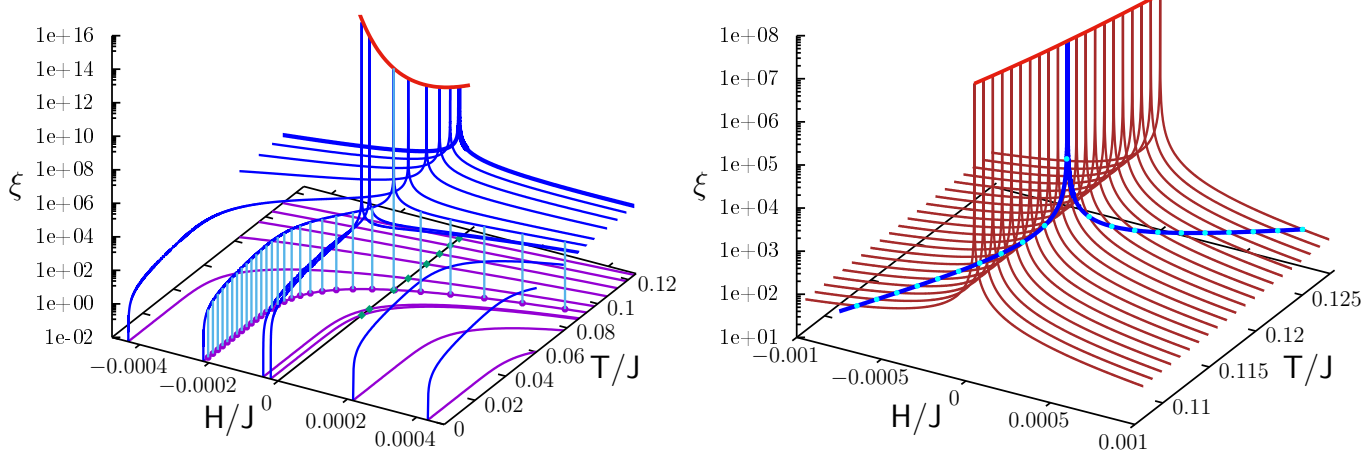


Рис. 2.17. Кореляційна довжина  $\xi$  (2.34) спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка на  $H/J - T/J$  площині для такого ж набору параметрів, як і на рис. 2.14. Голубі лінії на лівій панелі, які виходять з фіолетових дисків, відповідають значенню кореляційної довжини за фіксованого значення  $h = 12.75$  із монотонним ростом температури  $T = 0, 0.01, \dots, 0.29$ . Товстіша синя крива на лівій панелі відповідає  $\xi(T, h = 12.7)$ . На правій панелі наведена залежність  $\xi(T, h = 12.7)$  в іншому масштабі. Коричневі криві відповідають  $\xi(H)$  для звичайного ланцюжка Ізинга за температури  $T = 0.1079, 0.1089, \dots, 0.1279$ , а голубими дисками позначені точки їх перетину із синьою кривою. На обидвох рисунках червона крива відповідає залежності  $\xi(T/J, H = 0)$  для звичайного ланцюжка Ізинга.

пов'язана із вкладом від доданків, які пропорційні намагніченості  $m$  (червоні штрихові лінії для обидвох випадків).

Наостанок розглянемо температурну залежність теплоємності  $c$ . Як ми бачили раніше, поблизу псевдокритичної температури  $T_p$  магнітна сприйнятливості  $\chi(T_p)$  набуває великих значень, див. (2.41), (2.42), тому основний вклад у теплоємність (2.33) дає доданок, пропорційний  $\chi$ :  $c \approx c^{(6)} = T\chi(H'_{\text{eff}})^2$ . Отже, поблизу  $T_p$  температурна залежність теплоємності  $c$  і магнітної сприйнятливості  $\chi$  буде дуже схожою, бо множник  $T(H'_{\text{eff}})^2 \approx T(T - T_p)^2$  буде просто константою (див. рис. 2.22). На рис. 2.22 наведено теплоємність  $c$  для випадку  $\gamma = 0.7$  і  $h = 12.7$ . Із восьми доданків у (2.33) тільки три, а саме,  $c^{(1)}$ ,  $c^{(2)}$  і  $c^{(6)}$ , дають помітний вклад поблизу  $T = T_p$ . Всюди, окрім околу псевдокритичної температури,  $c^{(6)}$  є дуже малим. Як ми вже згадували раніше, сприйнятливості входить у теплоєм-

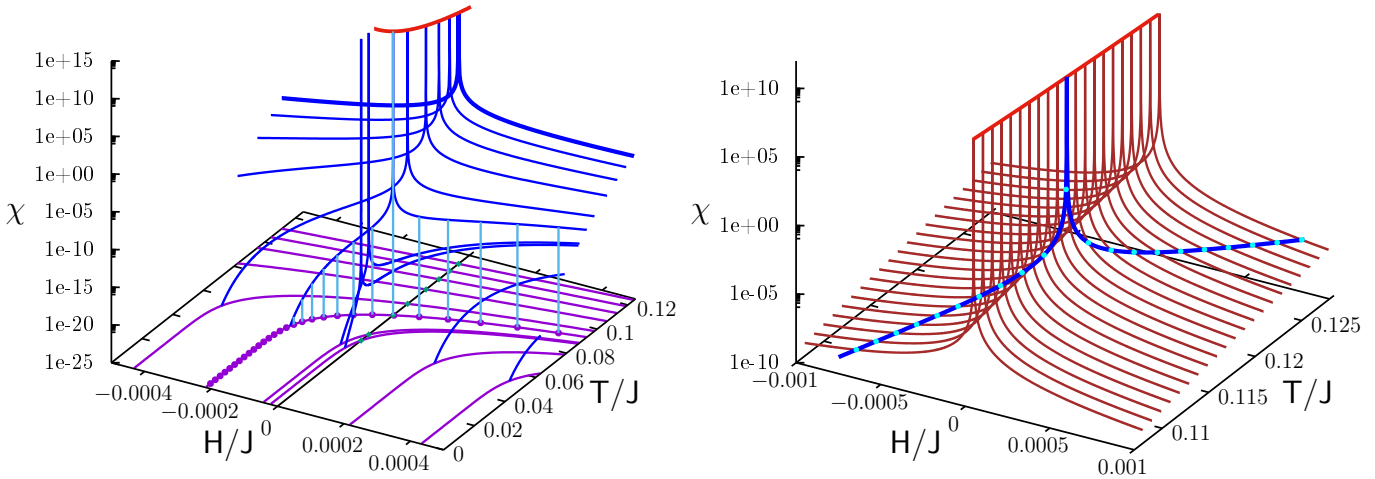


Рис. 2.18. Сприйнятливість  $\chi$  (2.30) спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка на  $H/J - T/J$  площині для такого ж набору параметрів як і на рис. 2.14. Товстіша синя крива на лівій панелі відповідає  $\chi(T, h = 12.7)$ . На правій панелі наведена залежність  $\chi(T, h = 12.7)$  в іншому масштабі. Коричневі криві відповідають  $\chi(H)$  для звичайного ланцюжка Ізинга за температури  $T = 0.1079, 0.1089, \dots, 0.1279$ , а голубими дисками позначені точки їх перетину із синьою кривою. На обидвох рисунках червона крива відповідає залежності  $\chi(T/J, H = 0)$  для звичайного ланцюжка Ізинга.

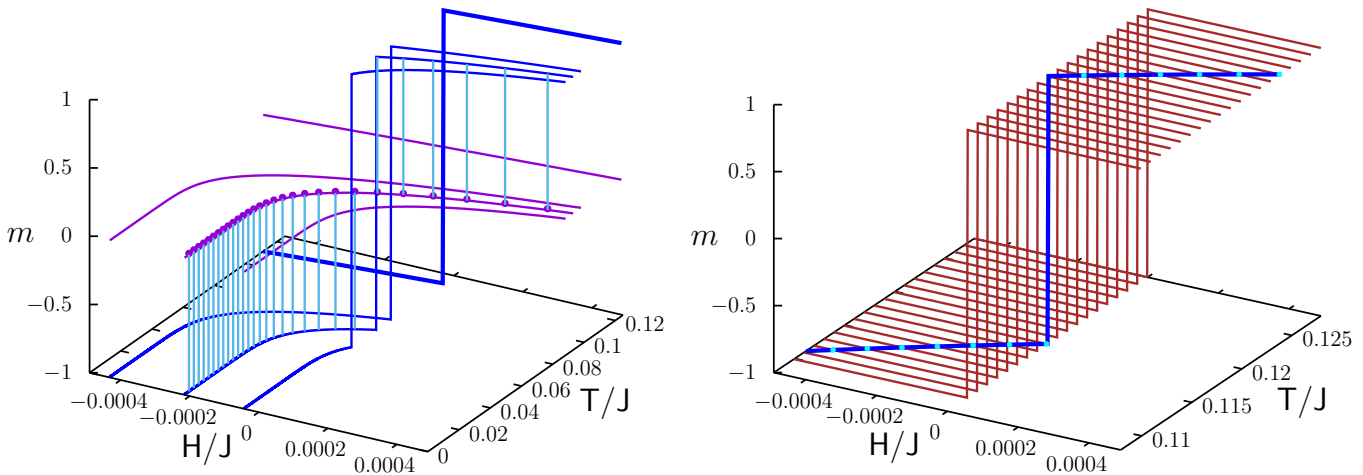


Рис. 2.19. Намагніченість  $m$  (2.29) спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка на  $H/J - T/J$  площині для такого ж набору параметрів як і на рис. 2.14. Фіолетові лінії на лівій панелі відповідають значенню намагніченості  $h = 12.7, 12.74, 12.745, 12.749$ . Товстіша синя крива на лівій панелі відповідає  $m(T, h = 12.7)$ . На правій панелі наведена залежність  $m(T, h = 12.7)$  в іншому масштабі. Коричневі криві відповідають  $m(H)$  для звичайного ланцюжка Ізинга за температури  $T = 0.1079, 0.1089, \dots, 0.1279$ , а голубими дисками позначені точки їх перетину із синьою кривою.



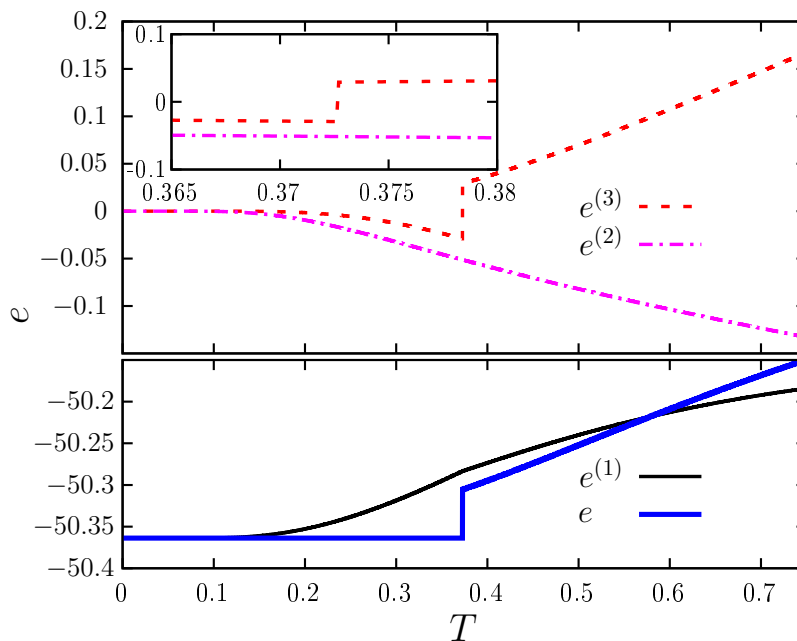


Рис. 2.20. Внутрішня енергія спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка для значень  $\gamma = 0.7$  і  $h = 12.7$ . Товсті сині криві відповідають  $e(T)$ , чорні, червоні і рожеві криві відповідають  $e^{(1)}(T)$ ,  $e^{(2)}(T)$  і  $e^{(3)}(T)$  відповідно. Поведінка внутрішньої енергії поблизу  $T_p \approx 0.372$  б наведена на вкладці.

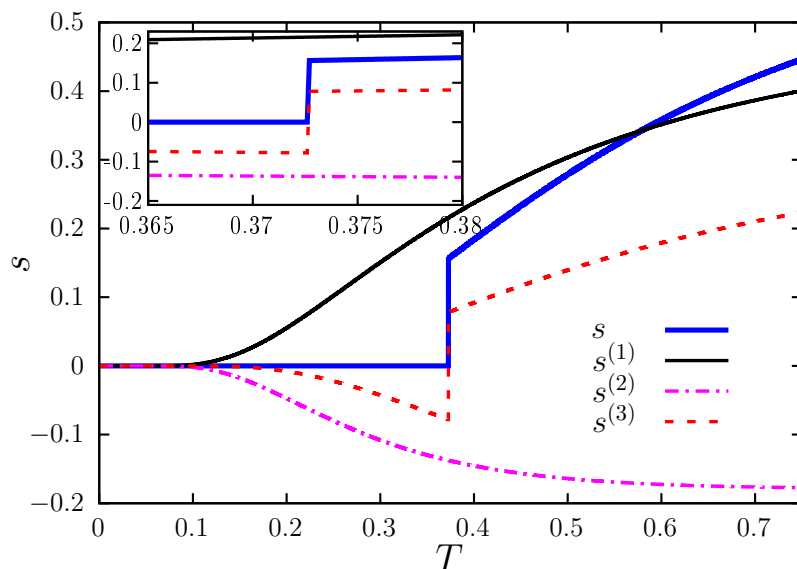


Рис. 2.21. Ентропія спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка для значень  $\gamma = 0.7$  і  $h = 12.7$ . Товсті сині криві відповідають  $s(T)$ , чорні, червоні і рожеві криві відповідають  $s^{(1)}(T)$ ,  $s^{(2)}(T)$  і  $s^{(3)}(T)$  відповідно. Поведінка ентропії поблизу  $T_p \approx 0.372$  б наведена на вкладці.

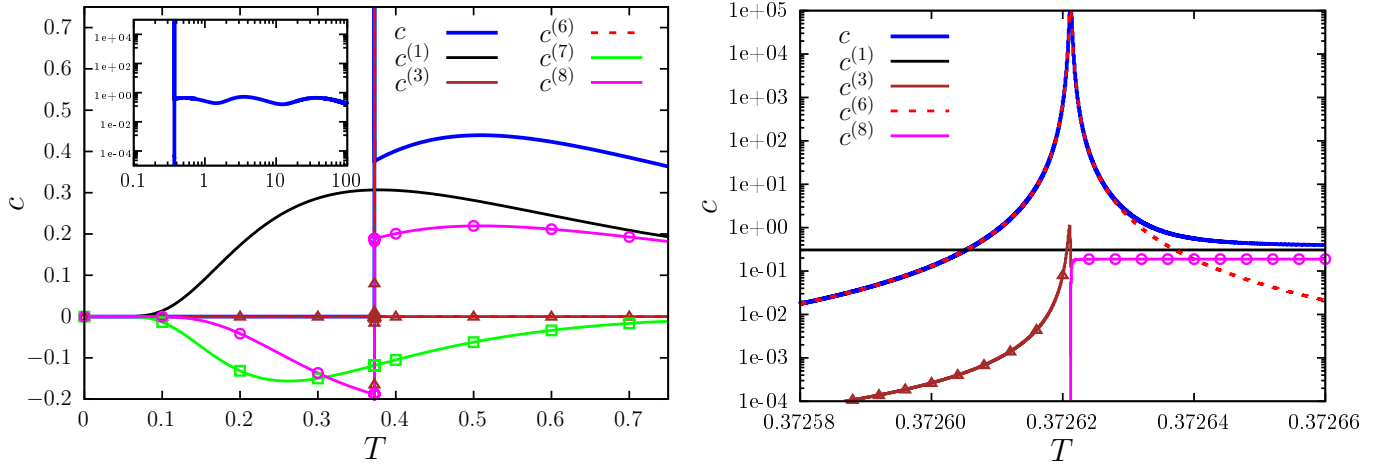


Рис. 2.22. Теплоємність  $c(T)$  спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка для значень  $\gamma = 0.7$  і  $h = 12.7$ . Товсті сині криві відповідають  $c(T)$ , тоді як чорні, коричневі з трикутниками, червоні штрихові, зелені з квадратами і рожеві з кільцями відповідають  $c^{(1)}(T)$ ,  $c^{(3)}(T)$ ,  $c^{(6)}(T)$ ,  $c^{(7)}(T)$  і  $c^{(8)}(T)$  відповідно (див. (2.33)). На вкладці лівої панелі зображено теплоємність у подвійному логарифмічному масштабі.

ність із множителем  $T(H'_{\text{eff}})^2$ , який може скомпенсувати великий вклад від  $\chi$ . На рис. 2.23 наведено приклад такої ситуації. Попри велике значення  $\chi(T_p)$ ,  $H'_{\text{eff}} \ll 1$  і теплоємність при такому наборі параметрів не має особливостей.

На рис. 2.24 зображено значення псевдокритичної температури  $T_p$  на  $\gamma - h$  площині. Із зменшенням величини  $T_p$  зростає значення кореляційної довжини  $\xi(T_p)$  (див. рожеві і червоні лінії). Тільки при наближенні до зеленої кривої, яка відповідає умові (2.23), низькотемпературні особливості виявляються найяскравіше.

Як у випадку декорованої драбинки Ізинга, поблизу псевдокритичної температури  $\xi \propto |H_{\text{eff}}|^{-1}$  і  $\chi \propto |H_{\text{eff}}|^{-3}$  див. (2.13) і (2.14) відповідно. Поблизу температури  $T = T_p$  маємо  $H_{\text{eff}} \propto T - T_p$ . Отже, будемо мати такий ж набір квазікритичних показників як і у випадку двонової драбинки Ізинга:  $\nu = \nu' = 1$ ,  $\alpha = \alpha' = \gamma = \gamma' = 3$ .

У цьому підрозділі ми зосередилися на спін-1/2 Ізинг-XYZ ланцюжку, але всі міркування годяться для спін-електронного ланцюжка подвійних тетраедрів і спін-1/2 ланцюжка подвійних тетраедрів Ізинга-Гайзенберга. Різниця між цими моделями лише у специфічних залежностях  $J_{\text{eff}}$  і  $H_{\text{eff}}$  від температури (див.

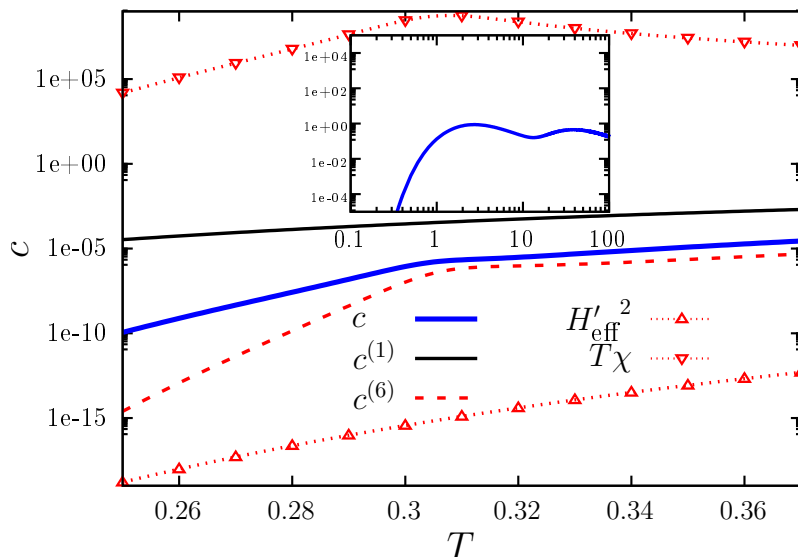


Рис. 2.23. Теплоємність  $c$  (2.33) спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка (2.16) для значень  $\gamma = 0.82$  і  $h = 7.916\ 228$ . Голуба крива відповідає  $c(T)$ , а суцільна чорна і штрихова червона відповідають  $c^{(1)}$  і  $c^{(6)}$  відповідно. Червоні криві із трикутниками вгору/вниз відповідають  $(H_{\text{eff}}')^2$  і  $T\chi$  (див. формулу для  $c^{(6)}$  у (2.33)). На вкладці зображено  $c(T)$  у подвійному логарифмічному масштабі.

рис. 2.14 – 2.16).

Підведемо підсумки. Ми пояснили причину низькотемпературних особливостей декількох декорованих ланцюжків, розглядаючи ефективний феромагнітний ланцюжок Ізинга із залежною від температури ефективною феромагнітною взаємодією  $J_{\text{eff}}(T)$  і ефективним полем  $H_{\text{eff}}(T)$ . При певному значенні температури  $T = T_p$  ( $H_{\text{eff}}(T_p) = 0$ ) ефективне поле змінює знак. Гострий пік кореляційної довжини  $\xi$ , теплоємності  $c$  і магнітної сприйнятливості  $\chi$ , а також стрибкоподібна поведінка внутрішньої енергії  $e$  і ентропії  $s$ , пов'язані із «залишками» критичної поведінки ланцюжка Ізинга. Ми з'ясували необхідні і достатні умови появи псевдопереходів, див. рис. 2.24. Також ми дослідили квазікритичну поведінку поблизу псевдокритичної температури  $T_p$ . Результати опубліковані у статті [33].

## 2.4. Висновки

У цьому розділі ми в деталях дослідили низькотемпературні особливості одновимірних декорованих систем Ізинга, які відомі в літературі як псевдопере-

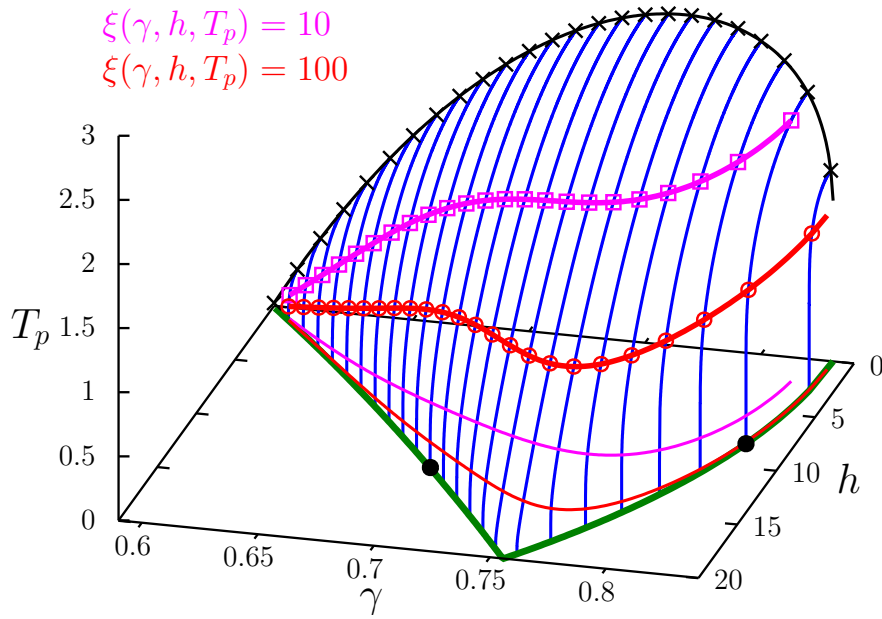


Рис. 2.24. Фазова діаграма для псевдокритичної температури  $T_p$  спін-1/2 Ізинг- $XYZ$  ромбічного ланцюжка (2.16) на  $\gamma - h$  площині. Сині криві відповідають залежності  $T_p(\gamma, h)$ ; товста червона крива із пустими кільцями відповідає значенню  $T_p$  при якому  $\xi(\gamma, h, T_p) = 100$  і  $2J_{\text{eff}}(T_p)/T_p \approx 5.298$  (тонша червона лінія — це проекція товстішої  $\gamma - h$  площину); товста рожева крива із пустими квадратами відповідає значенню  $T_p$  при якому  $\xi(\gamma, h, T_p) = 10$  і  $2J_{\text{eff}}(T_p)/T_p \approx 2.997$  (тонша рожева лінія — це проекція товстішої  $\gamma - h$  площину); зелена крива разом і лінією  $h = 0$  утворюють область, де  $H_{\text{eff}} < 0$  при  $T = 0$ ; дві чорні точки відповідають значенням  $\gamma = 0.7, h = 12.7$  і  $\gamma = 0.82, h = 7.916\ 228$ .

ходи [24, 102]. Незважаючи на тип декорації (класична чи квантова), або ж тип ґратки (ланцюжки чи драбинки) в даних системах спостерігається стрибкоподібна поведінка перших похідних від вільної енергії і гострий пік у других похідних від вільної енергії. Після застосування декораційно-ітераційного перетворення вихідні декоровані моделі Ізинга можна привести до вигляду звичайної моделі Ізинга із залежними від температури ефективними взаємодіями/полями на відповідних недекорованих ґратках. Ми показали, що саме ця температурна залежність модельних параметрів є причиною вищезгаданих термодинамічних особливостей і завжди пов'язана із «залишками» критичної поведінки простого ланцюжка Ізинга при нульовій температурі у нульовому полі [32, 33].

Ми з'ясували, чому кореляційна довжина  $\xi$ , теплоємність  $c$  і магнітна

Табл. 2.1. Одновимірні декоровані спінові моделі, у яких виявлені псевдопереходи.

гратка	модель	1D Ізинг
ромбічний ланцюжок	модель Ізинга [106]	✓
	Ізинг-XYZ [102]	✓
ланцюжок подвійних тетраєдрів	мобільні електрони [20]	✓
	Ізинг-Гайзенберг [19]	✓
двонога драбинка	модель Ізинга [26, 27]	✓
		✓
двонога драбинка	Ізинг-XXZ [24]	?
тринога трубка	Ізинг-XYZ [24]	?
ромбічний ланцюжок	розширена модель Габарда [109]	?
ланцюжок	модель Поттса [110]	?
шестикутна нанотрубка	модель Блюма-Капеля [111]	?

сприйнятливість  $\chi$  поблизу псевдокритичної температури  $T_p$  (але не при  $T = T_p$ ) виявляють степеневу поведінку з показниками  $\nu = \nu' = 1$ ,  $\alpha = \alpha' = 3$ ,  $\gamma = \gamma' = 3$  [32, 33]. Ми встановили необхідні і достатні умови для виникнення такої поведінки у одновимірних декорованих спінових системах. Зазначимо, що нещодавньо з'явилися нові приклади систем із псевдопереходом [109–111], зв'язок яких із нашим підходом ще потрібно з'ясувати, див. Табл. 2.1.

## РОЗДІЛ 3

# КВАНТОВА МОДЕЛЬ ГАЙЗЕНБЕРГА НА ТРИВИМІРНІЙ ГРАТЦІ ПІРОХЛОРУ

### 3.1. Вступ: гратка пірохлору і фізика магнетизму

Фізичні властивості квантової антиферомагнітної моделі Гайзенберга значною мірою залежать не тільки від вимірності простору, а також і від геометрії гратки. Зараз основні характеристики квантової моделі Гайзенберга на простих гратках добре досліджені. У випадку одновимірного ланцюжка квантові флуктуації руйнують дальній магнітний порядок спінів, зумовлюючи степеневе (для напівцілих значень спіну  $S$ ) і експоненційне (для цілих значень  $S$ ) згасання спінових кореляцій із відстанню [39, 112], тому при низьких температурах система перебуває у стані квантової спінової рідини. Двовимірна квадратна гратка має критичну точку для магнітного впорядкування при  $T_c = 0$  для довільного значення спіну  $S$  (магнітне впорядкування дещо редуковане через квантові флуктуації, особливо при  $S = 1/2$ ), але при скінченних температурах  $T > 0$  цей порядок руйнується тепловими флуктуаціями [40]. Для простої кубічної гратки очікується фазовий перехід між магнітною і парамагнітною фазами при скінченному значенні критичної температури  $T_c > 0$  для довільного значення спіну  $S \geq 1/2$ .

Значний прогрес у вивченні поведінки систем на простих гратках зумовлений можливістю як отримати точні результати в деяких випадках (наприклад, точний розв'язок для  $S = 1/2$  ланцюжка Гайзенберга [39]), так і побудувати ефективну теорію (наприклад,  $1/S$  розклади навколо квазікласичного основного стану), а також завдяки симуляціям методом квантового Монте Карло. У випадку ж геометрично фрустрованих ґраток цей потужний числовий метод незастосовний

через так звану проблему знаку [10], а надійних аналітичних методів немає. Тому критично важливими тут є числові симуляції для скінченних систем, а саме, метод точної діагоналізації, метод ренормалізаційної групи для матриці густини (DMRG) і метод багатозмінного варіаційного Монте Карло (mvMC) [28]. З допомогою цих методів вдалося встановити, що антиферромагнітна спін  $S = 1/2$  модель Гайзенберга із взаємодією між найближчими сусідами на двовимірній гратці кагоме при  $T = 0$  знаходиться у стані квантової спінової рідини [11–14]. Серед двовимірних ґраток є багато кандидатів, де очікується такий основний стан, або ж такий стан навіть спостережений експериментально (див. експерименти на гратці квадратне кагоме [59, 60]). Важливе запитання, яке досі без остаточної відповіді, чи є можливим стан квантової спінової рідини у тривимірному просторі?

На відміну від одновимірних і двовимірних геометрично фрустрованих ґраток тривимірні фрустровані системи є значно менш дослідженими. В першу чергу це пов'язано з тим, що досяжні на даний момент розміри систем є недостатніми щоб відкинути вплив скінченнорозмірних ефектів, а надійні аналітичні методи для дослідження таких моделей відсутні. Серед тривимірних геометрично фрустрованих ґраток ґратка пірохлору (див. рис. 3.1) має непроминальне значення у фізиці фрустрованих магнетиків. Вперше незвичні властивості ґратки пірохлору помітив Філіп Андерсон у роботі [113], де показав, що модель Ізинга із короткосяжними обмінними взаємодіями не має магнітного порядку, а основний стан макроскопічно вироджений, що приводить до ненульового значення ентропії на вузол при  $T = 0$ . Після роботи Жака Віллана [114] вдалося встановити, що класична модель Гайзенберга ( $S \rightarrow \infty$ ) перебуває у стані класичної спінової рідини [115, 116]. Ці результати для моделі Ізинга і для класичної моделі Гайзенберга дають підстави очувати, що у границі квантового спіну  $S = 1/2$  основний стан антиферромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору також не матиме магнітного порядку.

Дослідження властивостей основного стану спін  $S = 1/2$  антиферромагнітної моделі Гайзенберга на гратці пірохлору ведуться вже протягом трьох десятиліть. Однак, ані природа основного стану, ані значення енергії основного стану досі неві-

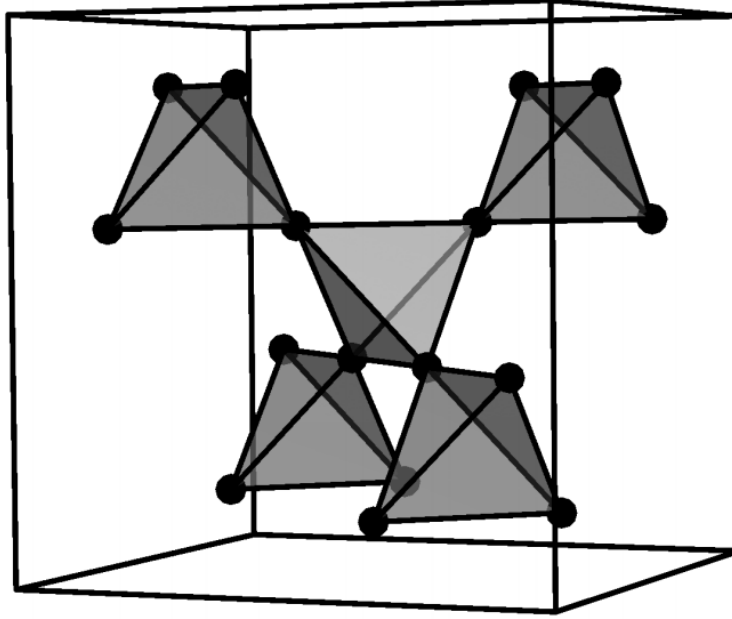


Рис. 3.1. Гратка пірохлору є тривимірною мережею тетраедрів із спільними вершинами. Її також можна представити як чотири взаємопроникні гранецентровані кубічні гратки, які розташовані у  $\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0)$ ,  $\mathbf{r}_2 = (0, 1/4, 1/4)$ ,  $\mathbf{r}_3 = (1/4, 0, 1/4)$ ,  $\mathbf{r}_4 = (1/4, 1/4, 0)$ . Вузли гранецентрованої кубічної гратки означені як  $\mathbf{R}_m = m_1\mathbf{e}_1 + m_2\mathbf{e}_2 + m_3\mathbf{e}_3$ , де  $m_1, m_2, m_3$  — цілі числа, а вестори  $\mathbf{e}_1 = (0, 1/2, 1/2)$ ,  $\mathbf{e}_2 = (1/2, 0, 1/2)$ ,  $\mathbf{e}_3 = (1/2, 1/2, 0)$ . Таким чином  $N$  вузлів гратки пірохлору задаються значеннями  $m\alpha$ ,  $\mathbf{R}_{m\alpha} = \mathbf{R}_m + \mathbf{r}_\alpha$ , де  $m = 1, \dots, \mathcal{N}$ ,  $\mathcal{N} = N/4$  — кількість елементарних комірок, а індекс  $\alpha = 1, 2, 3, 4$  означає вузли всередині елементарної комірки.

домі. Отримані результати сильно відрізняються в залежності від методу. В одній із перших робіт [117] теоретико-польовий і пертурбативний аналіз (розклади за ізольованими тетраедрами) вказують на наявність димерного параметра порядку і основний стан із порушенням трансляційної і ротаційної симетрії. Інші варіанти пертурбативного аналізу підтверджують це припущення [118, 119]. Теорія операторів на зв'язку вказує, що основний стан — кристал валентних зв'язків [120], розклади матриці густини [121, 122] і метод псевдоферміонної ренормалізаційної групи [123] — на стан квантової спінової рідини, метод варіаційного Монте Карло — на наявність кірального порядку [124], а ферміонна теорія середнього поля — на стан з монопольним потоком [125]. Це різноманіття можливих сценаріїв природи основного стану приводить до невизначеності значення енергії основного стану,



який, в залежності від методу, знаходиться в діапазоні  $e_0/J = -0.57, \dots - 0.43$ <sup>1</sup> (див. Табл. 3.2 і рис. 3.13).

Попри значний інтерес, термодинамічні властивості квантової антиферромагнітної моделі Гайзенберга на гратці пірохлору дуже мало досліджені. Однак, певні риси моделі все ж відомі. Пертурбативні розклади матриці густини [121, 122] і метод двочасових функцій Гріна в наближенні Кондо-Ямаджі [79] передбачають експоненційне згасання спін-спінових кореляцій із віддалю, а їх значення не перевищує міжатомної відстані. Також модель не виявляє жодного магнітного порядку при будь-якій температурі  $T \geq 0$  [79]. Структурний фактор має типовий металоподібний візерунок [79, 82, 126]. Для експериментальних величин досі відомі тільки результати методу діаграматичного Монте Карло для магнітної сприйнятливості  $\chi(T)$  до температури  $T/J = 1/6$  [82], а також дані для теплоємності  $c(T)$  і  $\chi(T)$  в методі двочасових функцій Гріна і високотемпературних розвинень [79]. Тому наразі тільки експеримент може пролити світло на термодинамічну поведінку цієї моделі.

Є ряд сполук, які є реалізацією спіну  $S = 1/2$  квантового антиферромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору. Серед них  $Y_2Mo_2O_7$  [127–130], а також оксинітрид  $Lu_2Mo_2O_5N_2$  [131, 132]. Експериментальні дані останнього вдається пояснити  $S = 1/2$  моделлю Гайзенберга, щоправда із включенням взаємодії між наступними сусідами [132]. До того ж, для цієї системи важливу роль відіграє спін-орбітальна взаємодія. Нині найбільш багатообіцяючим видається матеріал  $NaCaNi_2F_7$  [126, 133]. Непружне розсіяння нейтронів (див. права панель рис. 3.2) вдається дуже добре відтворити  $S = 1$  ізотропною моделлю Гайзенберга. На жаль, досі не вдалося знайти сполуку, яка б відповідала ізотропній моделі Гайзенберга з гранично квантовим значенням спіну  $S = 1/2$ .

Хоча обговорення вище стосувалося в основному антиферромагнітної взаємодії, цікавим також є і випадок ферромагнітної взаємодії. Звичайно, геометрично фрустрована гратка не впливає на властивості основного стану ферромагнетика,

<sup>1</sup>Зовсім нещодавно вдалося досягти значного прогресу для симуляцій методом DMRG [15] і mvMC [28] для достатньо великих систем. Ми обговоримо ці результати в кінці розділу.

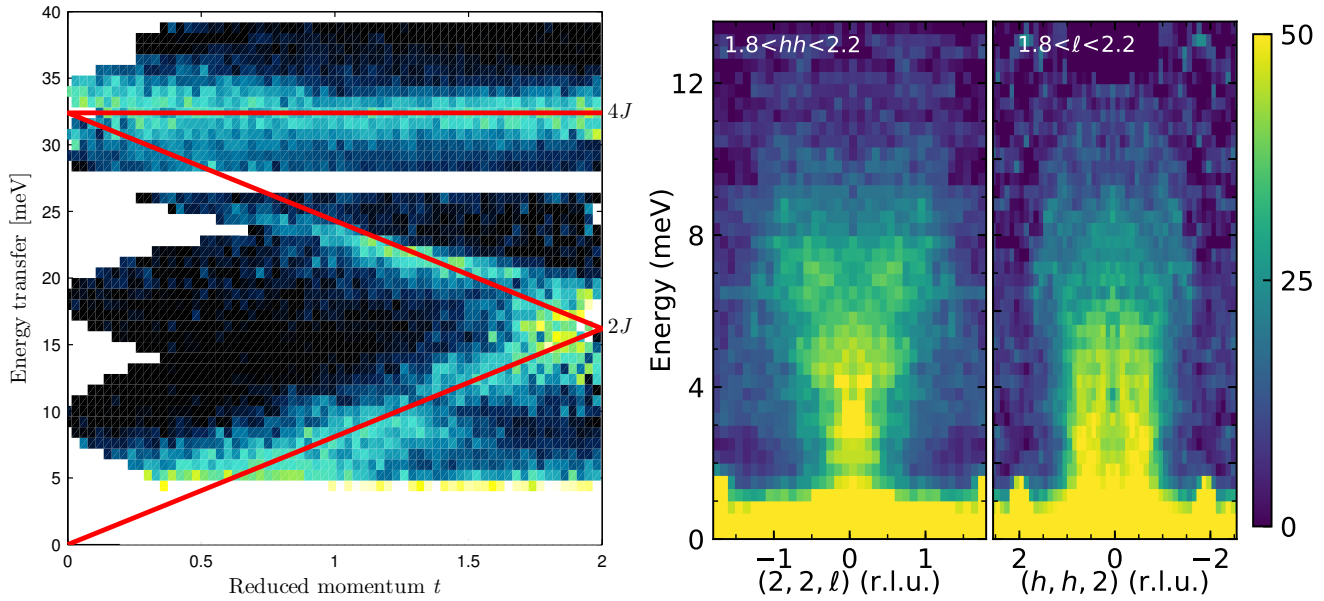


Рис. 3.2. Зліва: непружне розсіяння нейтронів ( $E_i = 50$  meV) квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$  на гратці пірохлору як функція приведенного імпульсу  $t$ . Чорні криві відповідають спектру спінових хвиль (рисунок взято із статті [134]). Справа: непружне розсіяння нейтронів у квантовому  $S = 1$  антиферомагнетик у Гайзенберга  $\text{NaCaNi}_2\text{F}_7$  (рисунок взято із статті [133]).

однак проявляє себе при скінченних температурах. Властивості феромагнетиків на фрустрованих гратках природньо порівнювати із відповідними властивостями таких спінових систем на нефрустрованих гратках із однаковим координаційним числом  $z$ . Для гратки пірохлору відповідною граткою є проста кубічна гратка. Такі гратки в наближенні середнього поля будуть однаковими, а вихід за межі середнього поля дозволить виявити вплив фрустрації на спостережувані величини при скінченних температурах.

Є досить багато експериментальних реалізацій феромагнетиків пірохлору [135–139]. Однією з них є сполука  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$  [134, 140, 141]. Цей квантовий  $S = 1/2$  феромагнетик Гайзенберга на гратці пірохлору  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$  є ізолятором Мотта із малою щільною. В ньому йони ванадію  $\text{V}^{4+}$  (локалізовані спіни  $S = 1/2$ ) формують гратку пірохлору. Аналіз експериментальних даних показує, що більш ніж задовільний опис експериментальних даних вдається досягти мінімальною моделлю Гайзенберга із взаємодією між найближчими сусідами із величиною  $J =$

8.22(3) меВ (в цьому матеріалі присутній вклад і від взаємодії Дзялошинського-Морія  $D = 1.5(1)$  меВ). Дані експерименту із розсіянням нейтронів наведено на лівій панелі рис. 3.2.

У цьому розділі будемо розглядати квантову  $S = 1/2$  модель Гайзенберга на гратці пірохлору із феромагнітною і антиферомагнітною взаємодією. Термодинаміку феромагнетика розглядатимемо в рамках методу двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова — такий аналіз досі не проведено, а отримані результати порівнюємо із відомими в літературі, отриманими іншими методами, а також із даними квантового Монте Карло, яке застосовне для феромагнетика. Антиферомагнетик Гайзенберга будемо розглядати в методі ентропії, результати для теплоємності і магнітної сприйнятливості порівнюємо із даними діаграматичного Монте Карло [82], а також із нещодавніми результатами DMRG і mvMC для скінченних систем. Результати досліджень цього розділу опубліковані у статтях [30, 31].

### 3.2. Метод функцій Гріна для квантового феромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору

Розгляньмо  $S = 1/2$  ізотропну модель Гайзенберга гратці пірохлору (див. рис. 3.1). Гамільтоніан моделі має наступний вигляд:

$$\begin{aligned}
 \mathcal{H} &= J \sum_{\langle \mathbf{m}\alpha; \mathbf{n}\beta \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{m};\alpha} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n};\beta} \\
 &= J \sum_{\mathbf{m}} \left( \mathbf{S}_{\mathbf{m};1} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{m};2} + \mathbf{S}_{\mathbf{m};1} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{m};3} + \mathbf{S}_{\mathbf{m};1} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{m};4} + \mathbf{S}_{\mathbf{m};2} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{m};3} \right. \\
 &\quad + \mathbf{S}_{\mathbf{m};2} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{m};4} + \mathbf{S}_{\mathbf{m};3} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{m};4} + \mathbf{S}_{\mathbf{m};1} \cdot \mathbf{S}_{m_1-1, m_2, m_3;2} + \mathbf{S}_{\mathbf{m};1} \cdot \mathbf{S}_{m_1, m_2-1, m_3;3} \\
 &\quad + \mathbf{S}_{\mathbf{m};1} \cdot \mathbf{S}_{m_1, m_2, m_3-1;4} + \mathbf{S}_{m_1-1, m_2, m_3;2} \cdot \mathbf{S}_{m_1, m_2-1, m_3;3} \\
 &\quad \left. + \mathbf{S}_{m_1-1, m_2, m_3;2} \cdot \mathbf{S}_{m_1, m_2, m_3-1;4} + \mathbf{S}_{m_1, m_2-1, m_3;3} \cdot \mathbf{S}_{m_1, m_2, m_3-1;4} \right), \tag{3.1}
 \end{aligned}$$

де перше сумування у (3.1) ведеться за найближчими сусідами  $\mathbf{m};\alpha$  і  $\mathbf{n};\beta$ ; друга сума стосується представлення гамільтоніану моделі в явному вигляді, де підсумовуємо за всіма вузлами елементарної комірки  $\mathbf{m}$ , у якій є 4 вузли,

$\mathbf{m} = (m_1, m_2, m_3)$ ,  $m_a = 1, \dots, \mathcal{L}_a$  ( $a = 1, 2, 3$ ),  $\mathcal{L}_1\mathcal{L}_2\mathcal{L}_3 = \mathcal{N}$ ; обмінна взаємодія  $J = -|J| < 0$  — ферромагнітна. Спінові оператори комутують на різних вузлах, а на вузлі задовольняють стандартним комутаційним співвідношенням:

$$[S^+, S^-] = 2S^z, \quad [S^\pm, S^z] = \mp S^\pm, \quad (3.2)$$

де оператори  $S^\pm = S^x \pm iS^y$  (звідси і надалі вважатимемо  $\hbar = 1$ ).

Розгляд термодинаміки розпочнемо із низькотемпературної поведінки, скориставшись лінійною теорією спінових хвиль (ще простіша теорія середнього поля приведена у додатку A.1). Застосуємо перетворення Гольштайна-Примакова [142], відразу залишивши тільки члени, які даватимуть вклад порядку  $S$ :

$$\begin{aligned} S^+ &= \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} a \approx \sqrt{2S} a, \\ S^- &= \sqrt{2S} a^\dagger \sqrt{1 - \frac{a^\dagger a}{2S}} \approx \sqrt{2S} a^\dagger, \\ S^z &= S - a^\dagger a. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Тут ми ввели стандартні бозонні оператори  $a_{\mathbf{m};\alpha}$  і  $a_{\mathbf{m};\alpha}^\dagger$  [ $a_{\mathbf{m};\alpha}, a_{\mathbf{n};\beta}^\dagger] = \delta_{\mathbf{m}\mathbf{n}}\delta_{\alpha\beta}$ ; підгратковий індекс  $\alpha = 1, 2, 3, 4$ , а  $m = 1, \dots, \mathcal{N}$ . Фур'є перетворення бозонних операторів має вигляд:

$$a_{\mathbf{q};\alpha} = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_m} a_{\mathbf{m};\alpha}, \quad (3.4)$$

де  $\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_m = q_1 m_1 + q_2 m_2 + q_3 m_3$ ,  $q_a = 2\pi z_a / \mathcal{L}_a$ ,  $z_a = 1, \dots, \mathcal{L}_a$  ( $a = 1, 2, 3$ ). Варто зазначити, що ми перейшли від координат  $q_1, q_2, q_3$  в оберненому просторі до декартових  $q_x, q_y, q_z$ :  $q_1 = (q_y + q_z)/2$ ,  $q_2 = (q_x + q_z)/2$ ,  $q_3 = (q_x + q_y)/2$ . Таким чином отримаємо гамільтоніан (3.1) у наближенні лінійної теорії спінових хвиль

$$\mathcal{H} = 12\mathcal{N}S^2J - 2SJ \sum_{\mathbf{q}} \left( a_{\mathbf{q};1}^\dagger a_{\mathbf{q};2}^\dagger a_{\mathbf{q};3}^\dagger a_{\mathbf{q};4}^\dagger \right) \mathbb{F} \begin{pmatrix} a_{\mathbf{q};1} \\ a_{\mathbf{q};2} \\ a_{\mathbf{q};3} \\ a_{\mathbf{q};4} \end{pmatrix}, \quad (3.5)$$

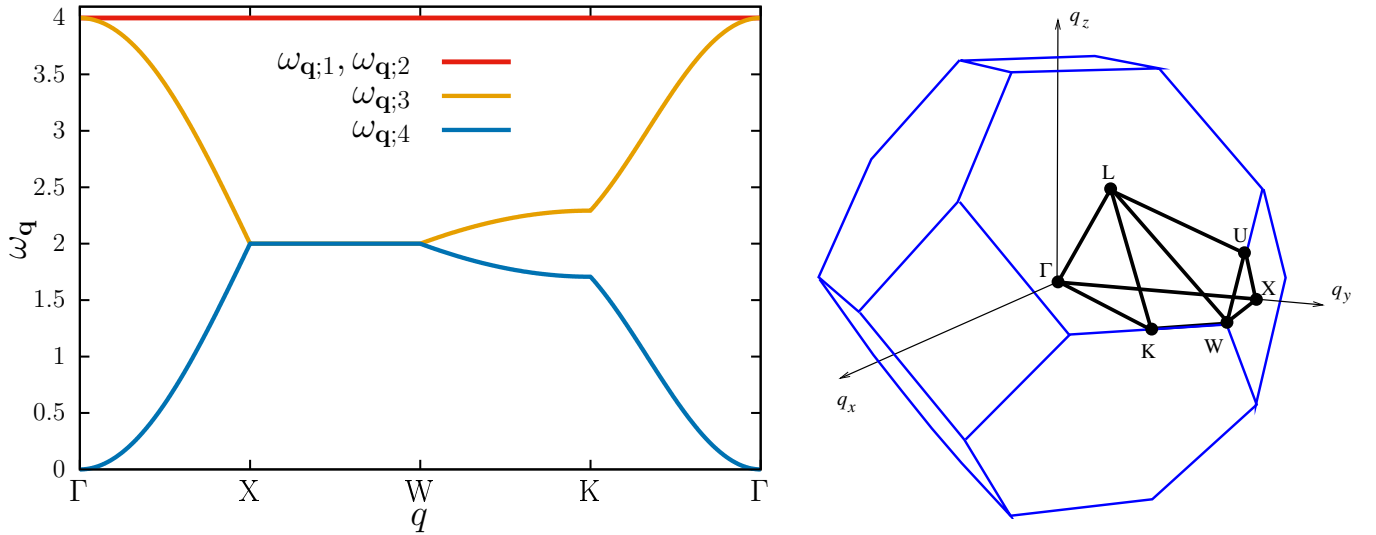


Рис. 3.3. Спектр збуджень феромагнітної  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на гратці пірохлору в наближенні лінійної теорії спінових хвиль (3.8) (ліворуч) вздовж шляху  $(\Gamma\text{-X-W-K-}\Gamma)$  між симетричними точками в зоні Бріллюена гранецентрованої кубічної гратки (праворуч).

де матриця  $\mathbb{F}$  має вигляд:

$$\mathbb{F} = \begin{pmatrix} 3 & -\phi_1 & -\phi_2 & -\phi_3 \\ -\phi_1^* & 3 & -\phi_{12}^* & -\phi_{13}^* \\ -\phi_2^* & -\phi_{12} & 3 & -\phi_{23}^* \\ -\phi_3^* & -\phi_{13} & -\phi_{23} & 3 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

$$\phi_a = e^{-\frac{iq_a}{2}} \cos \frac{q_a}{2}, \quad \phi_{ab} = e^{-\frac{i(q_a - q_b)}{2}} \cos \frac{q_a - q_b}{2}.$$

Діагоналізувавши білінійну форму (3.5), прийдемо до гамільтоніану невзаємодіючих бозонів (магنونів):

$$\mathcal{H} = 12\mathcal{N}S^2J - 2SJ \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\gamma;\mathbf{q}} \xi_{\mathbf{q};\gamma}^\dagger \xi_{\mathbf{q};\gamma}. \quad (3.7)$$

Тут енергія лінійних спінових хвиль (магنونів) визначається власними значеннями матриці  $\mathbb{F}$  (3.6)  $-2SJ\omega_{\gamma;\mathbf{q}} = |J|\omega_{\gamma;\mathbf{q}}$ :

$$\begin{aligned} \omega_{1;\mathbf{q}} &= \omega_{2;\mathbf{q}}, & \omega_{3;\mathbf{q}} &= 2 + D_{\mathbf{q}}, & \omega_{4;\mathbf{q}} &= 2 - D_{\mathbf{q}}, \\ D_{\mathbf{q}} &= 1 + \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_y}{2} + \cos \frac{q_x}{2} \cos \frac{q_z}{2} + \cos \frac{q_y}{2} \cos \frac{q_z}{2} \end{aligned} \quad (3.8)$$

(див. ліва панель рис. 3.3). Тепер з гамільтоніану (3.7) можемо обчислити нама-

гніченість

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m};\alpha} \langle S_{\mathbf{m};\alpha}^z \rangle = S - \frac{1}{4N} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} n_{\mathbf{q};\gamma} \quad (3.9)$$

і середню енергію на вузол

$$e = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = 3S^2 J - \frac{SJ}{2N} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \omega_{\gamma;\mathbf{q}} n_{\mathbf{q};\gamma}, \quad (3.10)$$

де  $n_{\mathbf{q};\gamma} = 1/(e^{J|\omega_{\gamma;\mathbf{q}}|/T} - 1)$  — розподіл Бозе-Айнштейна (стала Больцмана  $k_B = 1$  і значення спіну  $S = 1/2$ ). Ми будемо використовувати результати лінійної теорії спінових хвиль для намагніченості  $m = \langle S^z \rangle$  (3.9) і теплоємності  $c = \partial \langle e \rangle / \partial T$  при аналізі низькотемпературної термодинаміки в методі двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова.

Перейдемо до розгляду двочасових функцій Гріна [143–146]. Попри відносну простоту, метод досі використовується для теоретичного опису впорядкованих спінових моделей (див. нещодавні роботи [147–149]). Введемо наступні оператори

$$S_{\mathbf{q};\alpha}^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{\mp i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}} S_{\mathbf{m};\alpha}^{\pm} \quad (3.11)$$

і відтак запізнювальну функцію Гріна

$$G_{\alpha\beta}(t) \equiv \langle \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^+ | S_{\mathbf{q};\beta}^- \rangle \rangle_t = -i\Theta(t) \langle [S_{\mathbf{q};\alpha}^+(t), S_{\mathbf{q};\beta}^-(t)] \rangle, \quad G_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} dt e^{i\omega t} G_{\alpha\beta}(t), \quad (3.12)$$

для якої рівняння руху першого порядку мають вигляд:

$$\begin{aligned} \omega \langle \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^+ | S_{\mathbf{q};\beta}^- \rangle \rangle_{\omega} &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{m}} \langle S_{\mathbf{m};\alpha}^z \rangle \delta_{\alpha\beta} + i \langle \langle \dot{S}_{\mathbf{q};\alpha}^+ | S_{\mathbf{q};\beta}^- \rangle \rangle_{\omega}, \\ i\dot{S}_{\mathbf{q};\alpha}^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{R}_{\mathbf{m}}} [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}], \end{aligned} \quad (3.13)$$

див. [143–146]. При обчисленні комутатора у другому рядку формули (3.13) з'являється нова функція Гріна вищого порядку (деталі відповідних обчислень див. у додатку A.2). На цьому етапі ми застосуємо так зване наближення Тяблікова (наближення хаотичних фаз), де функція Гріна  $\langle \langle S_A^z S_B^+ | S_{\mathbf{q};\beta}^- \rangle \rangle \rightarrow$

$\langle S^z \rangle \langle \langle S_B^+ | S_{\mathbf{q};\beta}^- \rangle \rangle$  [144]. Це можна зробити, бо у ферромагнітній моделі при низьких температурах виникає намагніченість  $\langle S^z \rangle$ . Після цього ми отримаємо замкнену систему рівнянь для функцій Гріна:

$$\sum_{\gamma=1}^4 (\omega \delta_{\alpha\beta} + 2J \langle S^z \rangle \mathbb{F}_{\alpha\gamma}) G_{\gamma\beta}(\omega) = 2 \langle S^z \rangle \delta_{\alpha\beta}, \quad (3.14)$$

де  $-2J \langle S^z \rangle \mathbb{F}$  — матриця частот (тут матриця  $\mathbb{F}$  така ж як у лінійній теорії спінових хвиль (3.6)), матриця  $\mathbb{G}$  — матриця функцій Гріна, а  $\mathbb{M} = 2 \langle S^z \rangle \mathbb{I}$  — матриця моментів.

Можемо знайти власні значення і власні вектори матриці  $\mathbb{F}$ , які задовольняють  $\sum_{\beta} F_{\alpha\beta} \langle \beta | \gamma \mathbf{q} \rangle = \omega_{\gamma;\mathbf{q}} \langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle$  (власні значення  $\omega_{\gamma;\mathbf{q}}$  наведені в рівнянні (3.8)). Набір ортонормованих власних векторів занадто громіздкий, тому ми його тут не приводимо.

Тепер знайдемо функції Гріна з (3.14). Для цього скористаємось тотожністю  $\sum_{\gamma=1}^4 |\gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | = \mathbb{I}$ . Помножимо зліва обидві частини рівняння (3.14), будемо мати:

$$\mathbb{G} = 2 \langle S^z \rangle (\omega \mathbb{I} + 2J \langle S^z \rangle \mathbb{F})^{-1} |\gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | = \sum_{\gamma} \frac{2 \langle S^z \rangle}{\omega + 2J \langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}} |\gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} |, \quad (3.15)$$

а отже отримаємо остаточний результат:

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = 2S^z \sum_{\gamma=1}^4 \frac{\langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \beta \rangle}{\omega + 2J S^z \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}. \quad (3.16)$$

Тут  $\langle \gamma \mathbf{q} | \beta \rangle$  —  $\beta$ -ова компонента власного значення  $\langle \gamma \mathbf{q} |$ . Намагніченість  $\langle S^z \rangle$ , яка входить в рівняння (3.16), визначається самоузгодженим чином (див. далі рівняння (3.19)). Як видно із рівняння (3.16) енергія збуджень рівна  $-2J \langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}} = 2|J| \langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}$ . В низькотемпературній границі  $T \rightarrow 0$  (тобто коли  $\langle S^z \rangle \rightarrow S$ ) вона збігається із енергією збуджень в лінійній теорії спінових хвиль, тобто, з енергією магнонів. Із підвищенням температури залежність енергії збуджень від хвильового вектора не змінюється, а тільки перенормовується залежним від температури параметром порядку  $\langle S^z \rangle(T) < S$ . Для того, щоб детальніше врахувати темпе-

ратурну залежність збуджень, потрібно розщеплювати рівняння руху для функцій Гріна на наступному кроці (наприклад, в наближенні Кондо-Ямаджі [67], див. [77]). Оскільки  $D_{\mathbf{q}} \xrightarrow{\mathbf{q} \rightarrow 0} 2 - |\mathbf{q}|^2$ , то  $\omega_{4;\mathbf{q}}$  буде акустичною гілкою збуджень в спектрі  $\omega_{4;\mathbf{q}} \xrightarrow{\mathbf{q} \rightarrow 0} \rho |\mathbf{q}|^2$ , де спінова жорсткість  $\rho = |J| \langle S^z \rangle / 8$  пропорційна до намагніченості.

Знаючи функції Гріна, можемо обчислити відповідні кореляційні функції з допомогою відомої [143] спектральної теореми

$$\langle S_{\mathbf{q};\beta}^- S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle = \frac{i}{2\pi} \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{G_{\alpha\beta}(\omega + i\epsilon) - G_{\alpha\beta}(\omega - i\epsilon)}{e^{\frac{\omega}{T}} - 1} = 2 \langle S^z \rangle \sum_{\gamma=1}^4 \frac{\langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \beta \rangle}{e^{-\frac{2J \langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1}. \quad (3.17)$$

Таким чином нам одразу ж вдається обчислити термодинамічні спостережувані. Наприклад, використовуючи тотожність  $S^z = 1/2 - S^- S^+$ , знайдемо

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{m}, \alpha} \langle S_{\mathbf{m};\alpha}^- S_{\mathbf{m};\alpha}^+ \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle, \quad (3.18)$$

що приводить до самоузгодженого рівняння для намагніченості нижче критичної температури в наближенні Тяблікова:

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{\langle S^z \rangle}{2\mathcal{N}} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{e^{-\frac{2J \langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1}. \quad (3.19)$$

При температурі фазового переходу параметер порядку  $m \equiv \langle S^z \rangle = 0$ , тому, розклавши праву частину рівняння (3.19), ми знайдемо температуру Кюрі  $T_c$

$$\frac{T_c}{|J|} = \frac{2}{\frac{1}{N} \sum_{\alpha=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{\omega_{\alpha;\mathbf{q}}}} \approx 0.872, \quad (3.20)$$

де в термодинамічній границі ми перейшли від суми до інтегралу  $(1/N) \sum_{\mathbf{q}} (\dots) \rightarrow (1/\pi^3) \int_0^\pi dq_x \int_0^\pi dq_y \int_0^\pi dq_z (\dots)$ . Порівняння критичної температури, отриманої методом двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова, з іншими методами наведено в Табл. 3.1. Як бачимо, цей метод дає найвище значення  $T_c$  (якщо опустити результат теорії середнього поля, який взагалі



Табл. 3.1. Порівняння критичної температури  $T_c/|J|$  для феромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору і простій кубічній ґратці, отриманої методом квантового Монте Карло (QMC), методом високотемпературних розвинень (HTE), методом псевдоферміонної функціональної ренормалізаційної групи (PFFRG), методом двочасових функцій Гріна в наближенні Кондо-Ямаджі (RGM) і в наближенні Тяблікова (RPA). Також наведено значення критичної температури у наближенні середнього поля (MFA), однакове для обох ґраток.

метод	ґратка пірохлору	проста кубічна ґратка
QMC	0.718 [77]	0.839(1) [150]
HTE	0.724 $\cdots$ 0.754 [151]	0.827 [151]
PFFRG	0.77(4) [123]	0.90(4) [123]
RGM	0.778 [77]	0.926 [152, 153]
RPA	0.872 (рівняння (3.20))	0.989 [144]
MFA	1.5	1.5

не відчуває ґратки). Порівнюючи критичну температуру ґратки пірохлору із простою кубічною ґраткою, які є еквівалентними в наближенні середнього поля (див. додаток A.1), спостерігаємо вплив геометричної фрустрації при скінченних температурах. Теплові флуктуації «знищують» магнітний порядок на ґратці пірохлору ефективніше ніж на простій кубічній ґратці, що приводить до пониження значення критичної температури на приблизно 15%. Звичайно, в наближенні середнього поля критична температура  $T_c$  однакова для обох ґраток  $T_c = 3|J|/2$ .

Попри те, що наближення Тяблікова застосовне тільки в області температур  $T \leq T_c$ , можемо також знайти сприйнятливість у парамагнітній області [145, 154]. Розгляньмо безмежно мале магнітне поле  $h$ , тоді магнітна сприйнятливість  $\langle S^z \rangle = \chi h$ . Тепер гамільтоніан моделі міститиме доданок Зеємана  $\mathcal{H} - h \sum_{\mathbf{m}, \alpha} S_{\mathbf{m}, \alpha}$ , а розв'язок для функцій Гріна відрізнятиметься тільки зсувом спектру збуджень на значення поля  $h$ :  $2J \langle S^z \rangle \omega_{\gamma; \mathbf{q}} - h$ . Отже, замість рівняння (3.19) будемо мати

$$\langle S^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{\langle S^z \rangle}{2\mathcal{N}} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{1}{e^{-\frac{2J \langle S^z \rangle \omega_{\gamma; \mathbf{q}} - h}{T}} - 1}. \quad (3.21)$$

В парамагнітній фазі  $T > T_c$  намагніченість  $\langle S^z \rangle = 0$ , підставимо це значення у ліву частину рівняння і розкладемо експоненту враховуючи  $\langle S^z \rangle = \chi h$ . В такий

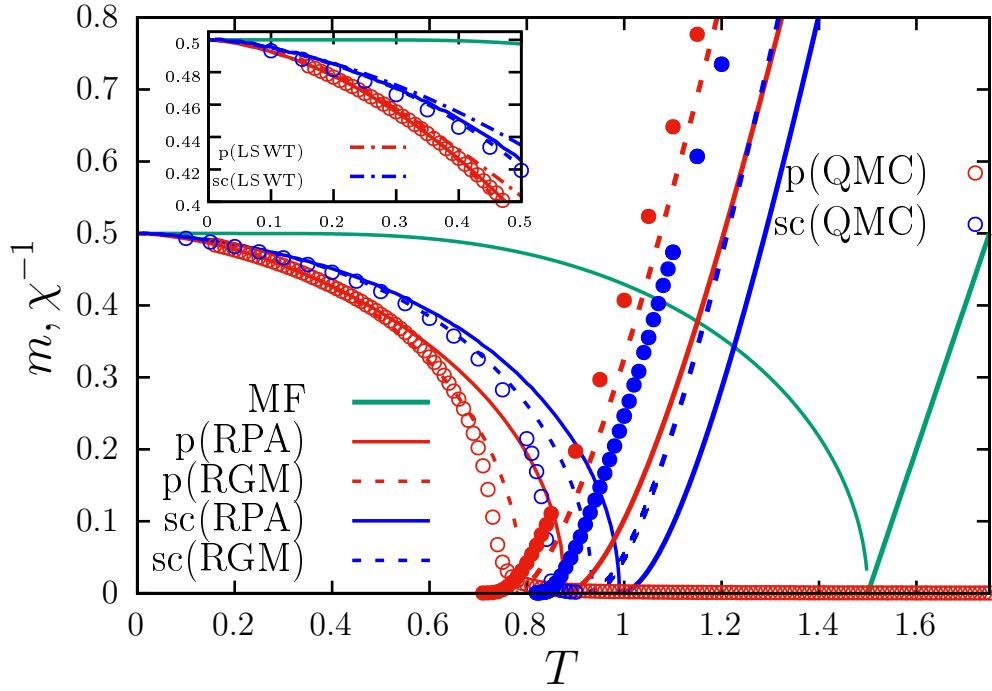


Рис. 3.4. Температурна залежність намагніченості  $m = \langle S^z \rangle$  (тонші криві) і оберненої магнітної сприйнятливості  $\chi^{-1}$  (товстіші криві) для  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору. Результати методу двочасових функцій Гріна в наближенні Тяблікова (3.19) і (3.22) (суцільні криві) в порівнянні з результатами в наближенні Кондо-Ямаджі [77] (штрихові криві). Дані квантового Монте Карло для  $m$  наведено незаповненими дисками, а для  $\chi$  — заповненими [30]. Для порівняння відповідні результати наведені і для простої кубічної гратки. Зелені криві відповідають наближенню середнього поля (однакові в обох випадках). На вкладці наведена низькотемпературна поведінка намагніченості разом із лінійною теорією спінових хвиль.

спосіб прийдемо до самоузгодженого рівняння для оберненої магнітної сприйнятливості  $\chi^{-1}$  в парамагнітній області:

$$1 = \frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{T}{-2J\omega_{\gamma;\mathbf{q}} + \chi^{-1}}. \quad (3.22)$$

На рис. 3.4 зображено розв'язки рівняння (3.19) для намагніченості  $m$  (у впорядкованій феромагнітній фазі) і оберненої магнітної сприйнятливості  $\chi^{-1}$  (у невпорядкованій парамагнітній фазі). Отримані результати порівнюються із симуляціями методом квантового Монте Карло та результатами наближення Кондо-

Ямаджі. Також для порівняння зображено відповідні величини для простої кубічної ґратки. У порівнянні із нефрустрованою простою кубічною ґраткою, щільніший енергетичний спектр ґратки пірохлору приводить до швидшого руйнування магнітного порядку і намагніченість спадає швидше з ростом температури.

Для того щоб знайти теплоємність в наближенні Тяблікова, нам потрібно врахувати вклад не тільки від поперечних, але і від поздовжніх кореляцій. Дотепер ми розглядали тільки функції Гріна  $\langle\langle S^+ | S^- \rangle\rangle$ , а не  $\langle\langle S^z | S^z \rangle\rangle$ . Тому потрібно розглянути допоміжну кореляційну функцію (і відповідні функції Гріна) [144, 155]. Деталі цих дещо громіздких обчислень наведено в додатку A.3, а тут ми наведемо тільки остаточний вираз для середньої енергії в наближенні Тяблікова:

$$\frac{\langle \mathcal{H} \rangle}{N} = \frac{3J\langle S^z \rangle}{2} - \frac{J\langle S^z \rangle^2}{2\mathcal{N}} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{e^{-\frac{2J\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1} + \frac{J\langle S^z \rangle}{2\mathcal{N}} \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\substack{\alpha,\beta=1 \\ (\alpha \neq \beta)}}^4 \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\alpha\beta} \frac{\langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \beta \rangle}{e^{-\frac{2J\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1},$$

$$\begin{aligned} \varphi_{12} &= \varphi_{21}^* = \phi_1, & \varphi_{13} &= \varphi_{31}^* = \phi_2, & \varphi_{14} &= \varphi_{41}^* = \phi_3, \\ \varphi_{23} &= \varphi_{32}^* = \phi_{12}, & \varphi_{24} &= \varphi_{42}^* = \phi_{13}, & \varphi_{34} &= \varphi_{43}^* = \phi_{23}, \end{aligned} \quad (3.23)$$

де функції  $\phi_a$  і  $\phi_{ab}$  визначені в рівнянні (3.6). Обчисливши похідну від  $\langle \mathcal{H} \rangle$  за температурою, ми отримаємо температурну залежність теплоємності  $c$  у впорядкованій фазі ( $T < T_c$ ). На рис. 3.5 отриманий результат для  $c(T)$  порівнюється із симуляціями методом квантового Монте Карло та іншими методами, а також із відповідними результатами для простої кубічної ґратки. В теорії середнього поля значення критичної температури значно завищене і становить  $3|J|/2$ , але теплоємність  $c(T_c)$  — скінченна. В наближенні Тяблікова теплоємність розбігається, що суперечить результатам, отриманими теоретико-польовими методами [156], високотемпературними розвиненнями, симуляціям методом квантового Монте Карло [157–159], а також результатам наближення Кондо-Ямаджі [77]. Наближення Тяблікова дає добре узгодження із даними квантового Монте Карло для температур нижче критичної  $T < T_c$ , однак поблизу критичної температури втрачає застосовність.

Наостанок розглянемо динамічний структурний фактор. Функції Гріна

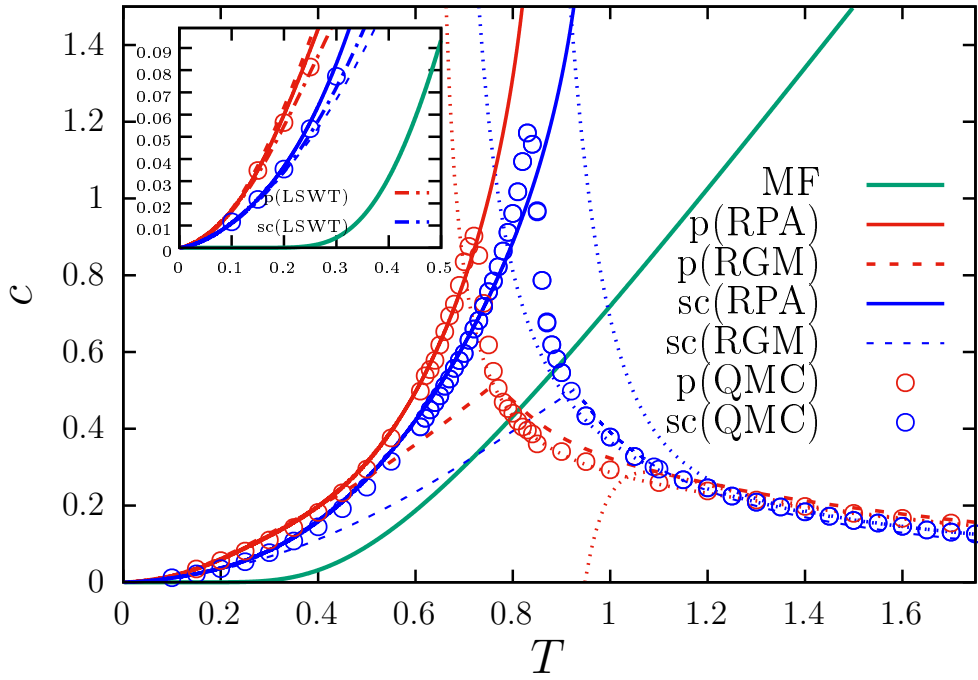


Рис. 3.5. Температурна залежність теплоємності  $c$  для  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору. Суцільні червоні криві відповідають результатам наближення Тяблікова ( $c = \partial \langle \mathcal{H} \rangle / \partial T$ ); червоні штрихові — наближення Кондо-Ямаджі [77]; дрібні штрихові — високотемпературний ряд 13-ого порядку і Паде апроксиманта [6, 7] [77]; незаповненими дисками зображені результати квантового Монте Карло [30]. Для порівняння також наведена теплоємність простої кубічної ґратки у відповідних наближеннях (ґратки мають однакові властивості в теорії середнього поля — зелена крива). На вкладці наведена теплоємність для низьких температур разом із теорією лінійних спінових хвиль.

(3.16) пов'язані із динамічною сприйнятливістю  $\chi_{\mathbf{q};\alpha\beta}^{+-}(\omega) = -G_{\alpha\beta}(\omega)$  [143]

$$\chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \sum_{\alpha,\beta=1}^4 \chi_{\mathbf{q};\alpha\beta}^{+-}(\omega), \quad (3.24)$$

яка пов'язана із динамічним структурним фактором. Отже, динамічний структурний фактор в наближенні Тяблікова:

$$S_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{2}{1 - e^{-\frac{\omega}{T}}} \Im \chi_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega) = \frac{\pi \langle S^z \rangle}{1 - e^{-\frac{\omega}{T}}} \sum_{\alpha,\beta,\gamma=1}^4 \langle \alpha | \mathbf{q} \gamma \rangle \langle \mathbf{q} \gamma | \beta \rangle \delta(\omega - 2|J| \langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}). \quad (3.25)$$

На рис. 3.6 наведено динамічний структурний фактор (3.25) в залежності від приведенного імпульсу  $t = 2 - D_{\mathbf{q}}$  (вираз для  $D_{\mathbf{q}}$  наведено у (3.8)). Тут для

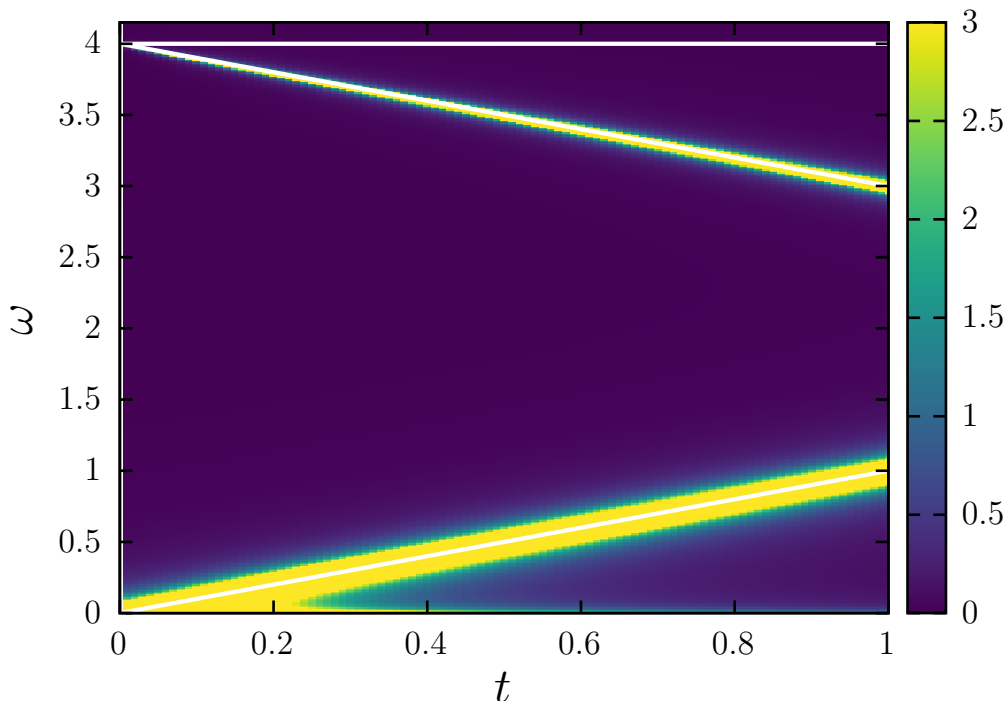


Рис. 3.6. Динамічний структурний фактор  $S_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  спін  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору в наближенні Тяблікова (3.25) як функція приведенного імпульсу  $t = 2 - D_{\mathbf{q}}$  вздовж шляху  $\mathbf{q} = (q, q, q)$  і при температурі  $T = 0.0425$ , інші деталі див. в основному тексті. Білі лінії відповідають спектру збуджень  $|J|\langle S^z \rangle \omega_{\gamma; \mathbf{q}}$ . Для порівняння із експериментом див. рис. 3.2.

обчислень замість дельта функції у (3.25) ми використали функцію Лоренца  $\delta(x) \rightarrow \epsilon/[\pi(x^2 + \epsilon^2)]$  з  $\epsilon = 0.01$ . Отриманий результат можна порівняти із непружним розсіянням нейтронів для  $S = 1/2$  феромагнетика пірохлору  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$  (див. рис. 3.2). Наведений на рис. 3.6 структурний фактор  $S_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  обчислений при температурі  $T = 0.0425$  і для вибраного шляху  $\mathbf{q} = (q, q, q)$ . Структурний фактор в наближенні Тяблікова якісно нагадує експериментальні дані непружного розсіяння нейтронів.  $S_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$  в основному зосереджений вздовж гілок збуджень  $\omega_{4; \mathbf{q}} = 4 - t$  і  $\omega_{3; \mathbf{q}} = t$ , а вклад від бездисперсійних гілок непомітний, див. рис. 3.6.

В цьому підрозділі ми дослідили термодинамічні величини (критичну температуру  $T_c$ , намагніченість  $m$ , обернену магнітну сприйнятливість  $\chi^{-1}$  і теплоємність  $c$ ), а також поперечний структурний фактор  $S_{\mathbf{q}}^{+-}(\omega)$   $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на гратці пірохлору у наближенні Тяблікова. Термодинамічна пове-

дінка порівняна із результатами симуляцій методом квантового Монте Карло, а динамічний структурний фактор — із непружним розсіянням нейтронів для сполуки  $\text{Lu}_4\text{V}_2\text{O}_7$ . Показано, що наближення Тяблікова дає задовільні результати при  $T < T_c$ . Результати, представлені в цьому підрозділі, опубліковані в статті [30].

### 3.3. Метод ентропії

Аналіз високотемпературних розвинень є одним із найуніверсальніших методів дослідження термодинамічної поведінки фізичних систем [160]. У фізиці магнетизму однією із перших робіт на цю тему є праця В. Опеховського 1937 року [161]. Значного розвитку метод зазнав протягом 60-70 рр. двадцятого століття. У цей період активно досліджувалися моделі Ізинга і Гайзенберга у різних вимірностях простору, однак, основний акцент був на вивченні критичної поведінки таких моделей та обчисленнях критичних показників. В той час були доступні високотемпературні розвинення до десятого порядку за оберненою температурою. Із ростом обчислювальних можливостей комп'ютерів зросли і порядки високотемпературних розвинень. До прикладу, для квантової  $S = 1/2$  ізотропної моделі Гайзенберга на гратці кагаме зараз відомі високотемпературні розвинення для теплоємності і магнітної сприйнятливості до двадцятого порядку [162]. Збільшення кількості обмінних взаємодій і значення спіну  $S$  суттєво ускладнює обчислення коефіцієнтів розвинення. У роботі [151] запропоновано алгоритм для обчислення високотемпературних розвинень теплоємності і магнітної сприйнятливості для моделі Гайзенберга із довільною кількістю обмінних взаємодій і довільним значенням спіну  $S$  до тринадцятого порядку. Аналіз високотемпературних розвинень дає можливість вивчати термодинамічну поведінку систем при високих і проміжних температурах, а також корисний при опрацюванні експериментальних даних, наприклад, для визначення значень констант обмінних взаємодій.

Одним із недоліків методу є те, що зазвичай високотемпературні розвинення розбігаються при температурах порядку обмінної взаємодії  $T \simeq J$ . Використання Паде апроксимант дозволяє розширити радіус збіжності до температур децю

нижчих температур  $T \simeq 0.5J$ . Однак, для багатьох систем найцікавішим є режим низьких температур, де високотемпературні розвинення незастосовні.

У низці статей французьких дослідників [29, 163, 164] запропоновано метод модифікації Паде аналізу високотемпературних розвинень теплоємності  $c(T)$  і однорідної магнітної сприйнятливості в нульовому полі  $\chi(T)$ , який дозволяє розширити область доступних температур аж до  $T = 0$  (метод ентропії). У цьому методі низькотемпературна поведінка теплоємності  $c(T)$  при  $T \rightarrow 0$  вважається відомою, а також виконуються правила сум для ентропії і енергії:

$$\int_0^{\infty} dT \frac{c(T)}{T} = \ln(2S + 1), \quad \int_0^{\infty} dT c(T) = e_{\infty} - e_0. \quad (3.26)$$

Наведемо основні положення методу ентропії. Із першого закону термодинаміки  $de = T ds$  випливає

$$\frac{ds}{dT} = \frac{1}{T} \frac{de}{dT} = \frac{c}{T}. \quad (3.27)$$

Тож перша похідна від ентропії за внутрішньою енергією рівна  $ds/de \equiv s'(e)$

$$s' = \frac{ds}{de} = \frac{ds}{dT} \frac{dT}{de} = \frac{c}{T} \frac{1}{de/dT} = \frac{1}{T}. \quad (3.28)$$

Відтак можемо виключити температуру із розгляду

$$c = \frac{de}{dT} = \left[ \frac{dT}{de} \right]^{-1} = \left[ \frac{d}{de} \left( \frac{1}{s'} \right) \right]^{-1} = -\frac{s'^2}{s''}. \quad (3.29)$$

Як бачимо, формально це перехід від розгляду термодинаміки у канонічному ансамблі до мікrokанонічного ансамблю. Тепер теплоємність  $c(T)$  задана параметрично як функція внутрішньої енергії  $e$  на проміжку  $e \in [e_0, e_{\infty}]$

$$T(e) = \frac{1}{s'(e)}, \quad c(e) = -\frac{s'(e)^2}{s''(e)}. \quad (3.30)$$

Далі будемо розглядати ентропію як функцію внутрішньої енергії, а формули (3.30) є основними у подальшому розгляді.

Як щойно зазначено, ми розглядаємо тепер ентропію як функцію внутрішньої енергії  $s(e)$ . Про неї відомо деяку точну інформацію при низьких і високих

температурах, а саме — значення функції на кінцях області визначення:

$$s(e) = \begin{cases} s(e_0) = 0, & T \rightarrow 0, \\ s(e_\infty) = \ln(2S + 1), & T \rightarrow \infty. \end{cases} \quad (3.31)$$

Якщо відомий високотемпературний розклад теплоємності  $c(T)$  до  $n$ -ого порядку

$$c_{T \rightarrow \infty} = \sum_{i=2}^n \frac{d_i}{T^i} + \mathcal{O}\left(\frac{1}{T^{n+1}}\right), \quad (3.32)$$

тоді відразу можна знайти розклад ентропії поблизу значення енергії  $e_\infty = 0$ . Для цього у (3.32) підставимо вирази для теплоємності і температури із (3.30), отримаємо диференціальне рівняння другого порядку для  $s(e)$

$$s''(e) \sum_{i=2}^n a_i s'(e)^i = -s'(e)^2. \quad (3.33)$$

Шукатимемо розв'язок рівняння (3.33) у вигляді ряду  $s(e) = \ln(2S + 1) + \sum_{i=2}^n b_i e^i$ , звідки знайдемо потрібні коефіцієнти  $b_i$ .

Для того щоб провести інтерполяцію між високими і низькими температурами, окрім цієї точної інформації про функцію  $s(e)$ , нам потрібно також знати низькотемпературну асимптотику ентропії, тобто поведінку при  $e \rightarrow e_0$ . Це визначається виглядом низькоенергетичного спектру системи. Надалі розглянемо два випадки: коли спектр низькоенергетичних збуджень безщілинний і має щілину. У першому випадку теплоємність матиме степеневу поведінку при низьких температурах  $c(T) \propto T^\alpha$ , а у другому — буде термічно активованою  $c(T) \propto e^{-\Delta/T}$ .

Спочатку розглянемо випадок безщілинного спектру. Якщо у системі є феромагнітний або антиферомагнітний порядок, а низькоенергетичними збудженнями є магнони, то низькотемпературна поведінка теплоємності набуває вигляду

$$c = AT^\alpha, \quad \alpha = \begin{cases} D/2 : & \text{для феромагнетика;} \\ D : & \text{для антиферомагнетика,} \end{cases} \quad (3.34)$$

де  $D$  — це вимірність простору. Однак, коли магнітний порядок відсутній, тоді степенева поведінка попередньо невідома. Тому, надалі ми розглядатимемо випадок  $c = AT^\alpha$ . Щоб знайти поведінку ентропії знову скористаємось рівнянням



(3.30), будемо мати

$$s''(e)s'(e)^{-2-\alpha} = -\frac{1}{A}. \quad (3.35)$$

Розв'язком цього рівняння буде

$$s(e) = \frac{A^{\frac{1}{1+\alpha}}}{\alpha} (1 + \alpha)^{\frac{\alpha}{1+\alpha}} (e - e_0)^{\frac{\alpha}{1+\alpha}}. \quad (3.36)$$

Отже, бачимо, що степенева залежність теплоємності  $c(T) \propto T^\alpha$  приводить до наступної асимптотики ентропії

$$s(e)|_{e \rightarrow e_0} \propto (e - e_0)^{\frac{\alpha}{1+\alpha}}. \quad (3.37)$$

Повернемося до випадку спектру із щільною  $c \propto T^{-\alpha} e^{-\Delta/T}$ . Тут також потрібно знайти низькотемпературну поведінку ентропії. Для знову запишемо рівняння для ентропії,

$$s''(e)s'(e)^{\alpha-2} e^{-\Delta s'(e)} = -\frac{1}{A}. \quad (3.38)$$

На жаль, це рівняння у вигляді простих функцій можна розв'язати лише для випадку  $\alpha = 2$ :

$$s(e)|_{e \rightarrow e_0} \propto -\frac{e - e_0}{\Delta} (\ln[\Delta(e - e_0)] - 1). \quad (3.39)$$

Досі нам вдалося з'ясувати асимптотики ентропії  $s(e)$  при  $e \rightarrow e_0$  для обох варіантів спектру. Для того, що провести інтерполяцію між високими і низькими температурами розглянемо так звані допоміжні функції [163, 164]. Оскільки низькотемпературна поведінка ентропії відрізняється для обох випадків спектру, то і допоміжні функції будемо вибирати різними.

Для безщілинного спектру введемо функцію [164]

$$G(e) = \frac{[s(e)]^{\frac{1+\alpha}{\alpha}}}{e - e_0} \quad (3.40)$$

і апроксимуватимемо її

$$G_{\text{app}} = G(0)[u, d](e), \quad G(0) = \frac{[\ln(2S + 1)]^{\frac{1+\alpha}{\alpha}}}{-e_0}. \quad (3.41)$$

Тут  $[u, d](e) = P_u(e)/Q_d(e)$  Паде апроксиманти, а коефіцієнти поліномів  $P_u$  і  $Q_d$  порядку  $u$  і  $d$  відповідно ( $u+d \leq n$ ) визначаються із умови, що розклад  $[u, d](e)$  збігається із розкладом  $G(e)/G(0)$  до порядку  $\mathcal{O}(e^{u+d})$ . Після цього знайдемо апроксимовану ентропію

$$s_{\text{app}}(e) = [(e - e_0)G_{\text{app}}(e)]^{\frac{\alpha}{1+\alpha}}. \quad (3.42)$$

Також можемо обчислити множник  $A$  у степеневій поведінці теплоємності  $c(T) = AT^\alpha$

$$A_{\text{app}} = \frac{\alpha^{1+\alpha}}{(1+\alpha)^\alpha} [G_{\text{app}}(e_0)]^\alpha. \quad (3.43)$$

Для випадку спектру із щілиною введемо допоміжну функцію [163]

$$G(e) = (e - e_0) \left( \frac{s(e)}{e - e_0} \right)' \quad (3.44)$$

і будемо її апроксимувати

$$G_{\text{app}} = G(0)[u, d](e), \quad G(0) = \frac{\ln(2S + 1)}{e_0}, \quad (3.45)$$

де  $[u, d](e)$  Паде апроксиманти із тими ж умовами, що і для безщілинного спектру. Після апроксимації знайдемо ентропію

$$\frac{s_{\text{app}}}{e - e_0} = \frac{\ln(2S + 1)}{-e_0} - \int_{e_0 \leq e \leq 0} d\xi \frac{G_{\text{app}}(\xi)}{\xi - e_0}. \quad (3.46)$$

Щілина для випадку низькотемпературної поведінки теплоємності  $c \propto T^{-2}e^{-\Delta/T}$

$$\Delta_{\text{app}} = -\frac{1}{G_{\text{app}}(e_0)}. \quad (3.47)$$

Досі ми розглядали тільки випадок у нульовому полі. Із включенням малого магнітного поля  $h$  всі термодинамічні величини також залежатимуть і від поля:  $s(e, h)$  [29]. Тепер намагніченість і однорідна магнітна сприйнятливність визначаються так:

$$m = \frac{1}{[s(e, h)]'} \frac{\partial s(e, h)}{\partial h}, \quad \chi = \frac{m}{h}. \quad (3.48)$$

При включенні магнітного поля високотемпературні розвинення теплоємності «зсунуться»

$$d_i \rightarrow d_i + \frac{(i-1)i}{2} c_{i-1} h^2, \quad i = 2, \dots, n, \quad (3.49)$$

де коефіцієнти  $c_i$  — це коефіцієнти високотемпературного розвинення магнітної сприйнятливості  $\chi(T) = \sum_{i=1}^n c_i T^{-i}$ . Після цього повторимо всю процедуру, як і у випадку нульового поля. Для безщілинного випадку всі вищезгадані міркування зберігаються, тільки тепер енергія основного стану  $e_0(h) = e_0 - \chi_0 h^2/2$ , де  $\chi_0 \equiv \chi(T=0)$  значення магнітної сприйнятливості в основному стані, яке вважається заздалегідь відомим. Для випадку спектру із щільною шлях обчислень не змінюється, оскільки енергія основного стану при включенні магнітного поля не змінюється ( $\chi_0 = 0$ )  $e_0(h) = e_0$ .

У цьому підрозділі ми показали як, знаючи високотемпературні розвинення теплоємності  $c(T)$  і однорідної магнітної сприйнятливості  $\chi(T)$ , можна обчислити ці термодинамічні величини на всьому інтервалі температур. Для цього також потрібно знати енергію основного стану  $e_0$ , значення показника  $\alpha$  і сприйнятливості в основному стані  $\chi_0$  у випадку безщілинного спектру і тільки енергію основного стану  $e_0$  у випадку безщілинного спектру. Цей метод вже успішно використовувався для аналізу термодинаміки квантової моделі Гайзенберга на кількох ґратках [29, 162–165]. Ми ж застосуємо метод до  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору.

### 3.4. Застосування методу ентропії до квантового антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору

Термодинамічну поведінку  $S = 1/2$  антиферромагнітної моделі Гайзенберга будемо розглядати методом ентропії, який описано у попередньому підрозділі. Гамільтоніан моделі має вигляд

$$\mathcal{H} = \sum_{\langle \mathbf{m}\alpha, \mathbf{n}\beta \rangle} \mathbf{S}_{\mathbf{m}\alpha} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}\beta}, \quad (3.50)$$

див. рис. 3.1. Тут ми зафіксували антиферромагнітне значення обмінної взаємодії  $J = 1$ , порівняймо з (3.1).

Для того, щоб провести інтерполяцію між високими і низькими температу-

Табл. 3.2. Енергія основного стану  $e_0 = E/N$  для  $S = 1/2$  антиферромагнітної моделі Гайзенберга на ґратці пірохлору

метод	$e_0$
лінійна теорія спінових хвиль [168]	-0.572
пертурбативний розклад матриці густини [122]	-0.56
метод ентропії [31]	-0.52
NLCE <sup>extr</sup> [15]	-0.495(15)
DMRG ( $N = 128$ ) [15]	-0.490(6)
середнє поле [117, 169]	-0.49 -0.4876
точна діагоналізація [170]	-0.482081 ( $N = 28$ ) -0.466971 ( $N = 36$ )
mvMC ( $N = 256$ ) [28]	-0.477(3)
NLCE [15]	-0.471
варіаційне Монте Карло [124]	-0.459
теорія операторів на зв'язку [120]	-0.45780
RGM [79]	-0.45093
ферміонна теорія середнього поля [125]	-0.4473

рами в методі ентропії, нам потрібно знати високотемпературну поведінку теплоємності  $c$  і магнітної сприйнятливості  $\chi$ , значення енергії основного стану  $e_0$ , а також низькотемпературну поведінку теплоємності (див. попередній підрозділ). Для високих температур ми використаємо високотемпературні розвинення до 13-ого порядку для теплоємності та сприйнятливості [151, 166, 167]. Відомі в літературі значення енергії основного стану  $e_0$  зазвичай суттєво різняться. В залежності від методу, значення  $e_0$  знаходяться в діапазоні  $e_0 = -0.572 \dots - 0.4473$  (для порівняння див. Табл. 3.2). Нещодавні симуляції методом DMRG [15] і mvMC [28] передбачають значення енергії основного стану в діапазоні  $e_0 = -0.49 \dots - 0.477$ . Водночас, природа низькотемпературних збуджень і відповідно низькотемпературна асимптотика теплоємності (степенева чи експоненційна) також невідома.

Для того, що обійти цю складність, скористаємося підходом, запропонованим у [162]. Надалі будемо розглядати значення енергії основного стану  $e_0$  як невідомий параметр. З попередніх досліджень методом ентропії [29, 162–165] відомо, що коли  $e_0$  відрізняється від точного значення (яке, взагалі кажучи, може

бути і невідомим) різні Паде апроксиманти не дають однакових результатів для спостережуваних і зростає кількість нефізичних Паде апроксимант (апроксимант з полюсами). Тільки для близького до справжнього значення  $e_0$  більшість Паде будуть давати близькі результати для спостережуваних. Кількість близьких Паде апроксимант  $n_P$  для кожного значення  $e_0$  вважатимемо критерієм наближеності вибраного значення енергії основного стану до справжнього. Надалі будемо діяти наступним чином: для кожного значення  $e_0$  обчислимо набір із десяти Паде апроксимант від десятого до тринадцятого порядку високотемпературних розвинень (наприклад, див. підпис на рис. 3.7). Відкинемо ті значення  $e_0$ , для яких кількість близьких Паде мала, і відтак будемо досліджувати область знайдених значень енергії основного стану із великим числом  $n_P$ . «Представником» кожної кривої  $c(T)$  в методі ентропії є значення множника  $A_{\text{app}}$  (3.43) для випадку безщілинного спектру  $c = AT^\alpha$  і значення щілини  $\Delta_{\text{app}}$  (3.47) для випадку спектру із щілиною  $c \propto e^{-\Delta/T}$ . Дуже близьким значенням  $A_{\text{app}}$  і  $\Delta_{\text{app}}$  відповідатимуть близькі криві  $c(T)$ . Надалі ми детально розглянемо обидва випадки: щілинного і безщілинного спектру.

Розпочнемо розгляд із припущення про спектр із щілиною. В цьому випадку низькотемпературна поведінка теплоємності має вигляд  $c \propto T^{-2}e^{-\Delta/T}$ . Метод ентропії дозволяє обчислити значення щілини  $\Delta_{\text{app}}$  (3.47). На рис. 3.7 зображено значення щілини  $\Delta_{\text{app}}$  в залежності від значення енергії основного стану  $e_0$ . Починаючи від значення  $e_0 \approx -0.515$ , щілина набуває нефізичних від'ємних значень. Тобто, можемо відразу відкинути область  $e_0 \gtrsim -0.515$  для випадку спектру із щілиною. Для вузького проміжку  $e_0 = -0.519 \dots - 0.517$  значення всіх Паде апроксимант із вибраного набору є достаньо близькими  $\Delta_{\text{app}} = 0.16 \dots 0.18$  (див. права панель рис. 3.7). Для значень  $e_0 < -0.521$  знайдена щілина  $\Delta_{\text{app}}$  відризняється для різних значень енергії основного стану, що приводить до суттєвого зменшення кількості близьких Паде апроксимант.

На рис. 3.8 зображено теплоємність  $c(T)$  і магнітну сприйнятливість  $\chi(T)$ . Для теплоємності бачимо велику кількість близьких Паде для енергії основного стану  $e_0 = -0.519, -0.518$ , а при відхиленні від цих значень кількість близьких

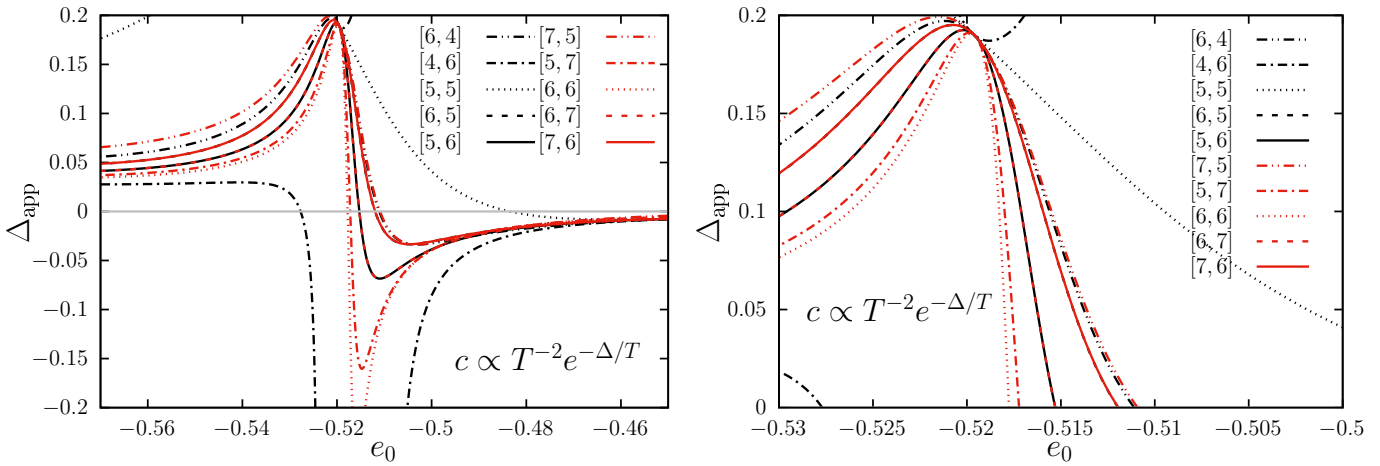


Рис. 3.7. Значення щілини від  $\Delta_{\text{app}}$  (3.47) в залежності від взятого значення енергії основного стану  $e_0$ . Ліворуч зображено щілину в діапазоні  $e_0 = -0.57 \dots - 0.45$ , а праворуч у вузькому діапазоні  $e_0 = -0.53 \dots - 0.5$ .

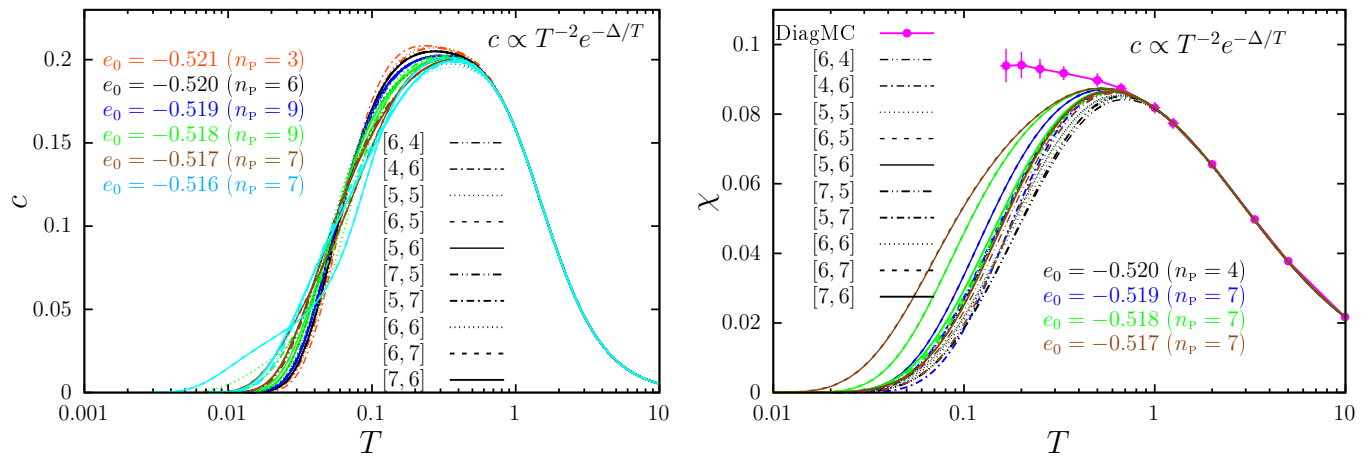


Рис. 3.8. Теплоємність  $c$  (ліворуч) і магнітна сприйнятливості  $\chi$  (праворуч) для  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору за припущення, що спектр із щілиною  $c \propto T^{-2} e^{-\Delta/T}$ . Взяті значення енергії основного стану змінюється в діапазоні  $e_0 = -0.521 \dots - 0.516$  для теплоємності і  $e_0 = -0.520 \dots - 0.517$  для сприйнятливості. Приведене значення  $n_p$  відповідає кількості близьких Паде апроксимант для відповідного  $e_0$ .

Паде починає швидко спадати. Кількість близьких Паде для магнітної сприйнятливості є значно меншою (це пов'язано із відсутністю правил сум для сприйнятливості, див. попередній підрозділ). До того ж, отримані результати не узгоджуються із симуляціями методом діаграматичного квантового Монте Карло для температур  $T < 0.7$  [82].

Тепер розглянемо випадок безщілинного спектру. У цьому випадку низь-

котемпературна поведінка теплоємності має степеневу залежність  $c = AT^\alpha$ . Оскільки значення  $\alpha$  наразі невідоме, будемо використовувати значення  $\alpha = 1, 3/2, 2, 5/2, 3$ . Як і у випадку спектру із щільною спочатку подивимось на залежність множника  $A_{\text{app}}$  (3.43) від взятого значення  $e_0$ . Для кожного значення  $\alpha$  є виділений вузький діапазон, де криві методу ентропії є близькими, див. рис. 3.9. Для  $\alpha = 1$ :  $e_0 = -0.515 \dots - 0.513$ , для  $\alpha = 3/2$ :  $e_0 = -0.518 \dots - 0.516$ , для  $\alpha = 2$ :  $e_0 = -0.521 \dots - 0.518$ , для  $\alpha = 5/2$ :  $e_0 = -0.522 \dots - 0.520$ , для  $\alpha = 3$ :  $e_0 = -0.521 \dots - 0.518$ . Аналіз множника  $A_{\text{app}}$  відповідає низькотемпературній області кривої  $c(T)$ . Тепер подивимось на залежність від значення  $e_0$  максимального значення теплоємності  $c_{\text{max}}(T_{\text{max}})$ , див. рис. 3.10. Знову для певних значень  $e_0$  для всіх Паде апроксимант отримуємо дуже близькі результати. Зазначимо, що діапазон значень  $e_0$ , для яких спостерігаються близькі результати для  $T_{\text{max}}$  і  $c(T_{\text{max}})$  узгоджується із отриманим діапазоном значень  $e_0$ , для яких спостерігаються близькі результати для множника  $A_{\text{app}}$ .

На рис. 3.11 наведено теплоємність і сприйнятливості у припущенні безщілинного спектру  $c \propto T^\alpha$  для  $\alpha = 3/2, 2, 5/2$  (результати із  $\alpha = 1, 3$ , для яких є гірша збіжність Паде апроксимант наведена у додатку Б). У випадку безщілинного спектру нам необхідно також знати  $\chi_0$  — значення магнітної сприйнятливості при  $T = 0$ . Метод двочасових функцій Гріна в наближенні Кондо-Ямаджі [79] передбачає ненульове значення  $\chi_0$ . Такого ж варто очікувати і з симуляцій методом діаграматичного Монте Карло [82]. Ми розглянемо значення  $\chi_0 = 0, 0.08, 0.1$ . Для випадку  $\chi_0 \approx 0.1$  бачимо добре узгодження із результатами діаграматичного Монте Карло [82].

На рис. 3.12 забражено результати із найбільшою кількістю близьких Паде апроксимант  $n_P$  для безщілинного спектру із значенням  $\alpha = 3/2, 2, 5/2$ . Теплоємність  $c(T)$  і магнітна сприйнятливості  $\chi(T)$  порівнюються обчисленнями методом двочасових функцій Гріна [79] і симуляціями методом діаграматичного Монте Карло (для сприйнятливості) [82]. На нижній панелі 3.12 наведено порівняння ентропії антиферромагнітної моделі Гайзенберга на гратці пірохлору із ентропією простої кубічної гратки (дані квантового Монте Карло взяті з [150]). Бачимо



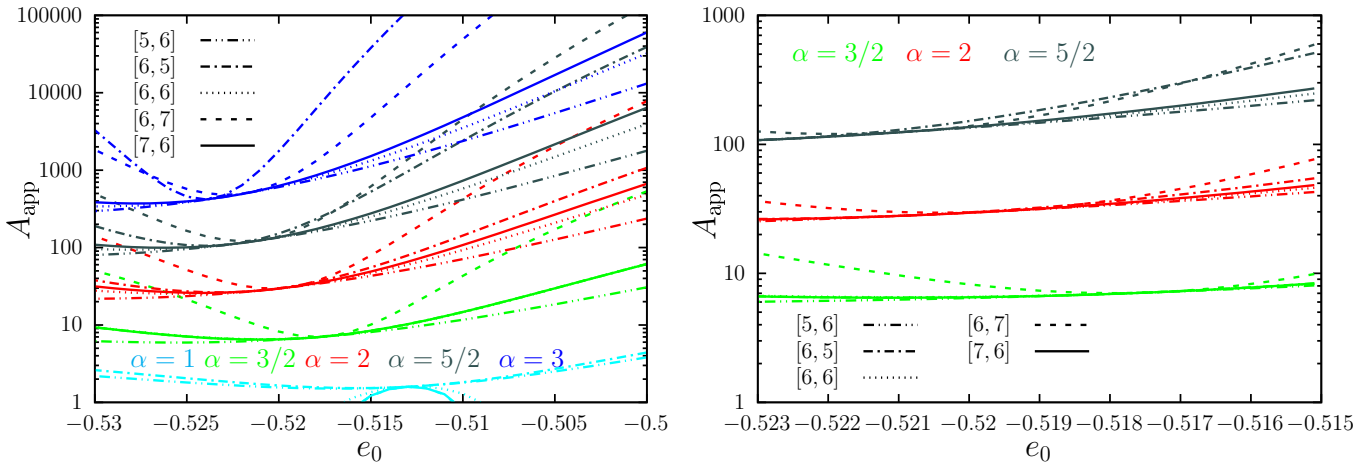


Рис. 3.9. Множник  $A_{\text{app}}$  (3.43) у випадку безщілинного спектру  $s = AT^\alpha$ ,  $\alpha = 1, 3/2, 2, 5/2, 3$  в залежності від значення енергії основного стану  $e_0$ . Ліворуч зображено щілину в діапазоні  $e_0 = -0.57 \dots -0.45$ , а праворуч у вузькому діапазоні  $e_0 = -0.523 \dots -0.515$  для значень  $\alpha = 3/2, 2, 5/2$ .

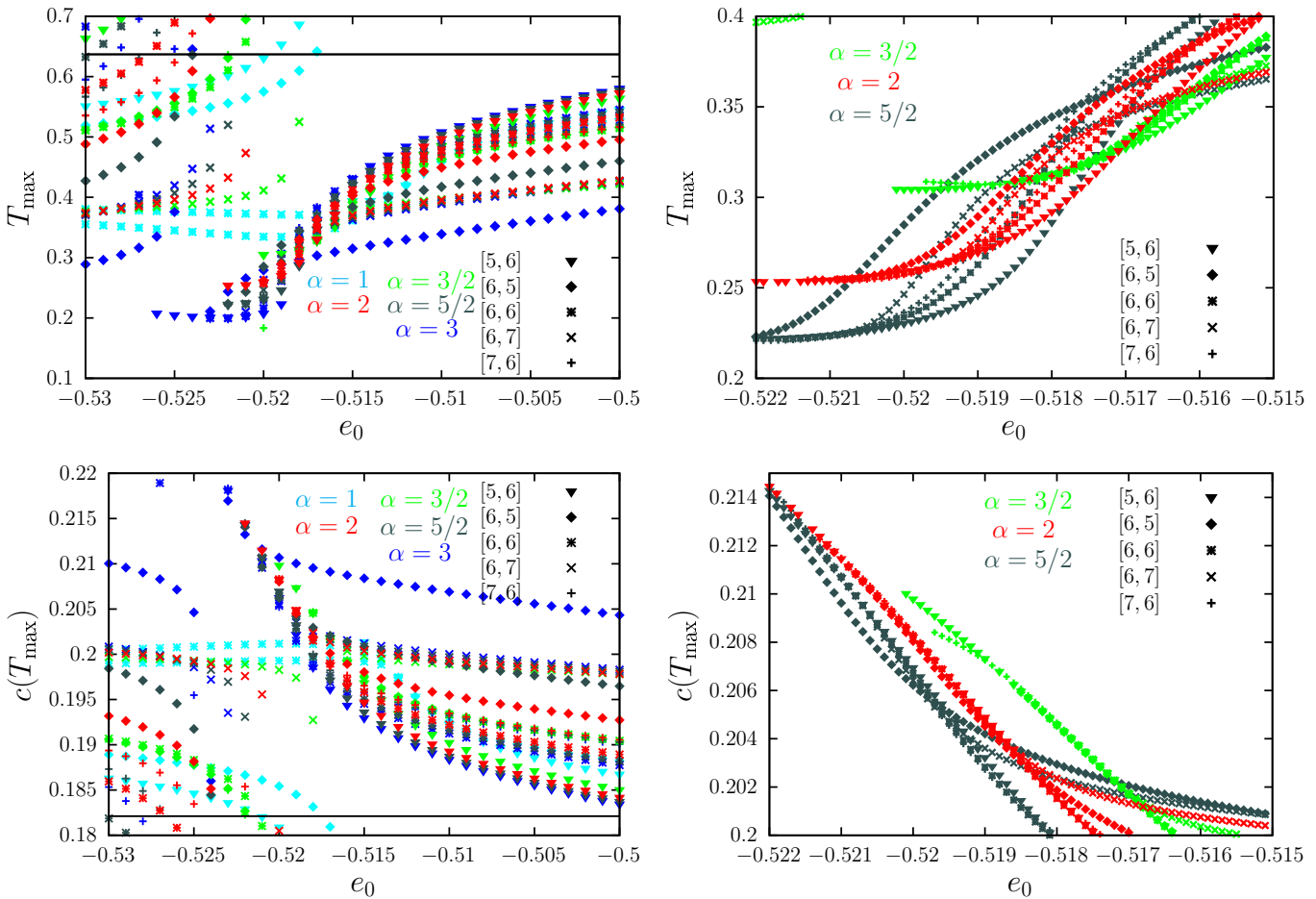


Рис. 3.10. Положення температури максимуму теплоємності  $T_{\text{max}}$  (верхня панель) і відповідного значення теплоємності  $c(T_{\text{max}})$  (нижня панель) у випадку безщілинного спектру  $s \propto T^\alpha$ . На лівих панелях зображено відповідні значення для  $\alpha = 1, 3/2, 2, 5/2, 3$  у діапазоні  $e_0 = -0.53 \dots -0.5$ , а чорні лінії відповідають значенням  $T_{\text{max}} \approx 0.637$  і  $c(T_{\text{max}}) \approx 0.182$  Паде апроксиманти  $[6, 7]$  від високотемпературного розвинення теплоємності  $c$ . На правих панелях зображено  $T_{\text{max}}$  і  $c(T_{\text{max}})$  у вузькому інтервалі  $e_0 = -0.522 \dots -0.515$  для значень  $\alpha = 3/2, 2, 5/2$ .



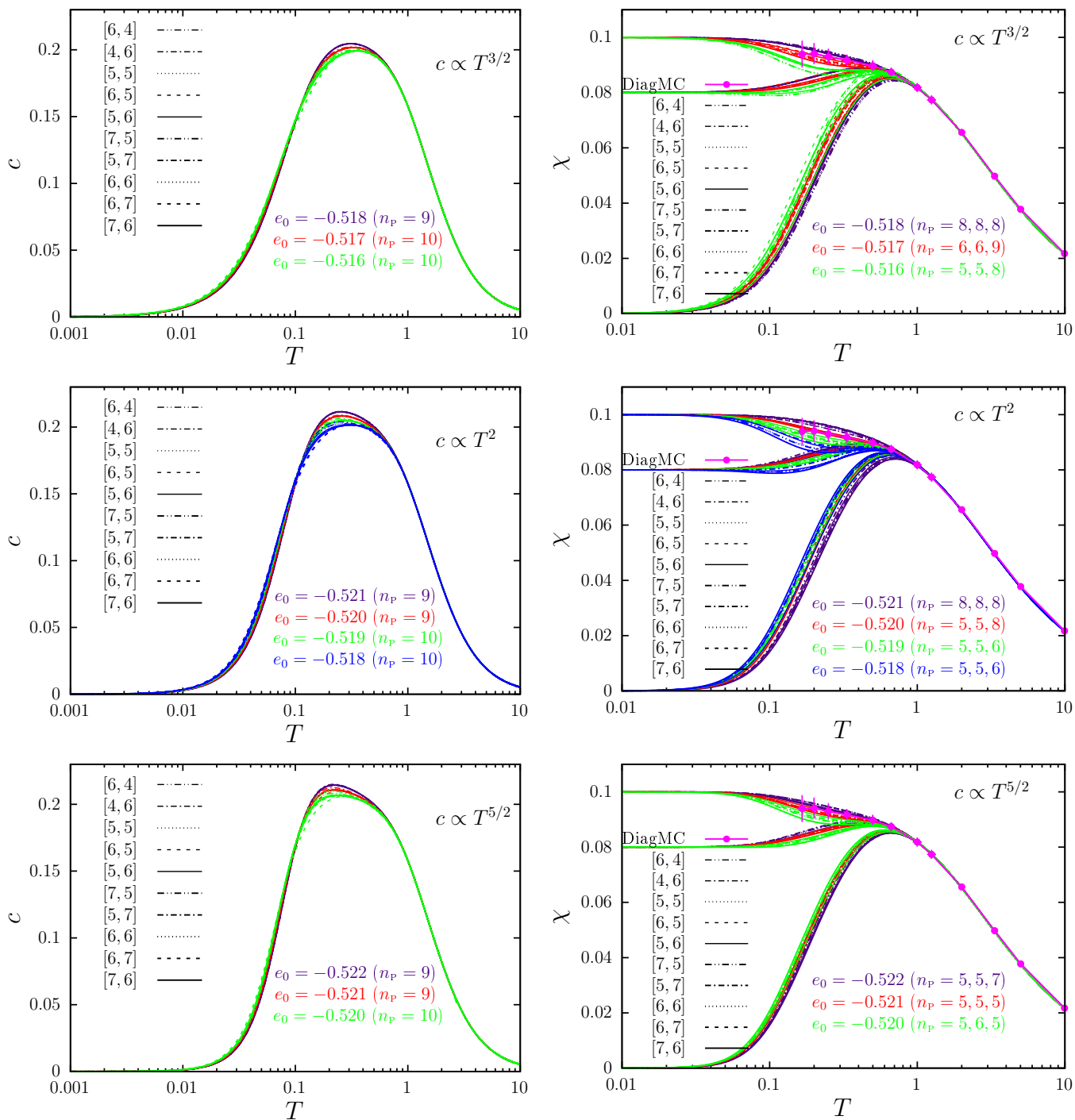


Рис. 3.11. Теплоємність  $c$  (ліва колонка) і магнітна сприйнятливості  $\chi$  (права колонка)  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору у випадку безщільного спектру  $c \propto T^\alpha$ . Зверху відповідні величини наведено для випадку  $\alpha = 3/2$  (для значень енергії основного стану  $e_0 = -0.518 \dots - 0.516$ ); посередині для  $\alpha = 2$  ( $e_0 = -0.521 \dots - 0.518$ ); знизу для  $\alpha = 5/2$  ( $e_0 = -0.522 \dots - 0.520$ ). Значення  $n_P$  відповідає кількості близьких Паде апроксимант для відповідного  $e_0$ . При обчисленні сприйнятливості використовувалися три значення  $\chi_0 = 0, 0.08, 0.1$ .

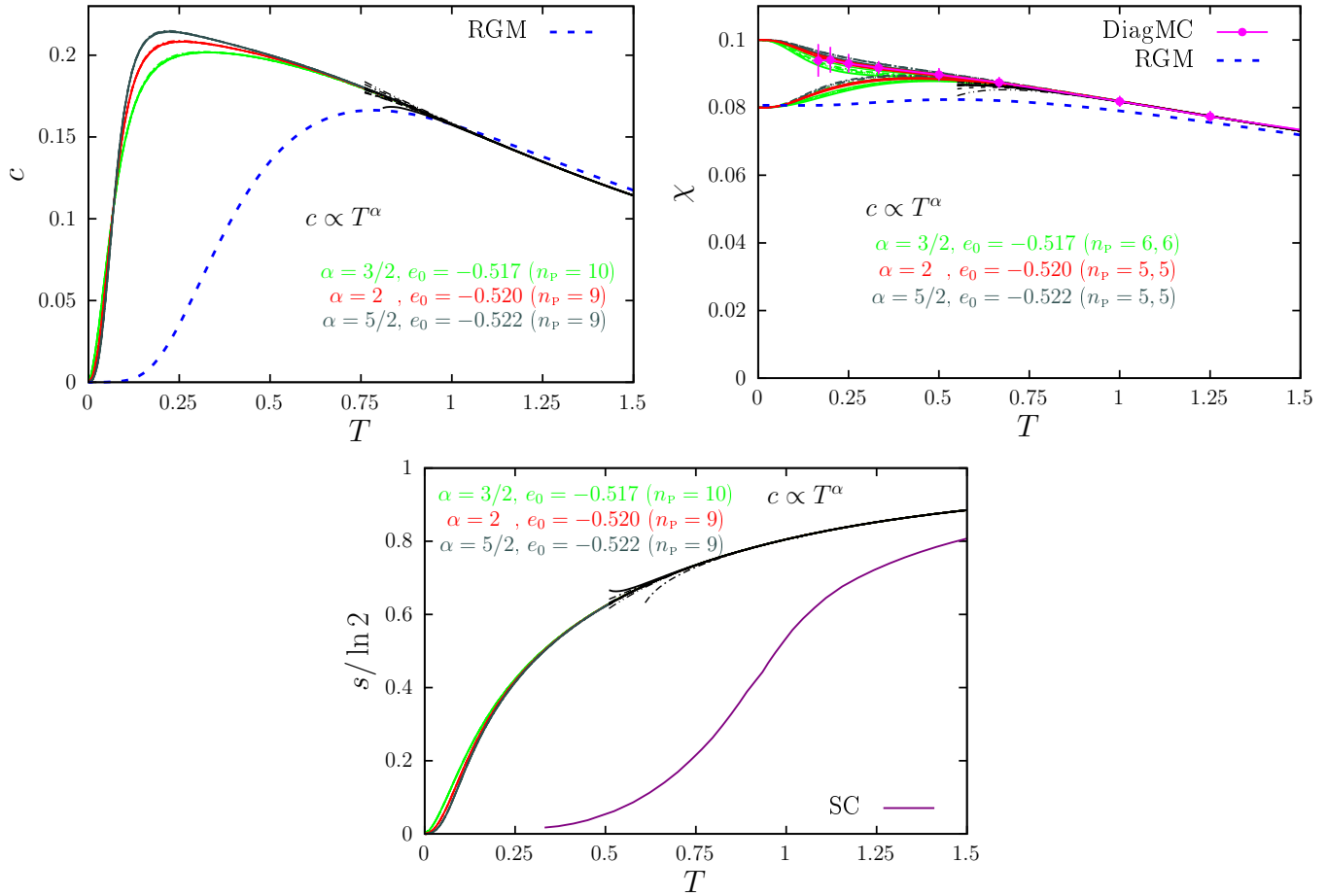


Рис. 3.12. Теплоємність  $c$  (зверху ліворуч), магнітна сприйнятливість  $\chi$  (зверху праворуч) і ентропія  $s$  для  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору у випадку безщільного спектру  $c \propto T^\alpha$  ( $\alpha = 3/2, 2, 5/2$ ). Результати методу ентропії для  $c$  і  $\chi$  порівнюються із результатами методу двочасових функцій Гріна в наближенні Кондо-Ямадзі [79] і методу діаграматичного квантового Монте Карло (для сприйнятливості) [82]. Ентропія порівнюється із симуляціями методом квантового Монте Карло для простої кубічної ґратки [150]. Чорні криві відповідають набору Паде апроксимант.

сильний вплив геометричної фрустрації на термодинамічну поведінку системи: для фрустрованої ґратки пірохлору ентропія вивільнюється значно швидше з ростом температури ніж для простої кубічної.

У цьому підрозділі ми дослідили теплоємність  $c$ , ентропію  $s$  і однорідну магнітну сприйнятливість  $\chi$  квантового  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору методом ентропії. На основі високотемпературних розвинень до тринадцятого порядку за оберненою температурою для  $c(T)$  і  $\chi(T)$ , ми провели

інтерполяцію між низькими і високими температурами ентропії  $s$  як функції внутрішньої енергії  $e$ . В рамках даного методу ми не знайшли низькотемпературних особливостей типу плеча чи додаткового максимуму у температурній залежності теплоємності  $c(T)$  для ґратки пірохлору (на відміну від двовимірної ґратки кагоме [11], див. також нещодавній препринт [171]). Щоправда, при цьому спостерігається значний зсув положення головного максимуму теплоємності в область низьких температур  $T/J \approx 0.25$ , що значно нижче ніж значення  $T_{\max}/J = 0.67$  для ґратки кагоме [11, 162]. Цей висновок справедливий як у випадку безщілинного спектру, так і для спектру із щілиною. Отримані результати дають підстави вважати, що сценарій безщілинного спектру вірогідніший. Найбільша кількість збіжних Паде апроксимант була знайдена для випадку  $c \propto T^2$ . Також ми передбачаємо значення енергії основного стану  $e_0 \approx -0.52$ . У порівнянні із нещодавніми симуляціями методом DMRG [15] і методом варіаційного Монте Карло (mvMC) [28], метод ентропії дає на декілька відсотків занижене значення  $e_0$  (для порівняння з іншими методами див. табл. 3.2 і рис. 3.13). Отримані результати для магнітної сприйнятливості добре узгоджуються із симуляціями методом діаграматичного Монте Карло [82] у припущенні ненульового значення  $\chi$  при  $T = 0$ :  $\chi_0 \approx 0.08$ . Результати, представлені у цьому підрозділі, опубліковані у статті [31].

Наостанок слід зауважити, що властивості при  $T = 0$  і  $T > 0$  спін  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору привертають велику увагу в останні місяці. Після публікації нашої статті з'явилося кілька робіт присвяченим таким же питанням, однак, із застосуванням цілком інших підходів [15, 16, 28, 172]. При цьому отримане нами значення енергії основного стану  $e_0 \approx -0.52$  на декілька відсотків перевищує значення DMRG [15] і mvMC [28], які передбачують дещо вище значення  $e_0 = -0.490(6)$  і  $e_0 = -0.477(3)$  відповідно. Потребують детального обговорення результати для теплоємності і магнітної сприйнятливості у порівнянні із даними чисельних розкладів за з'єднаними тетраедрами [172], які збудовані із високотемпературної границі.

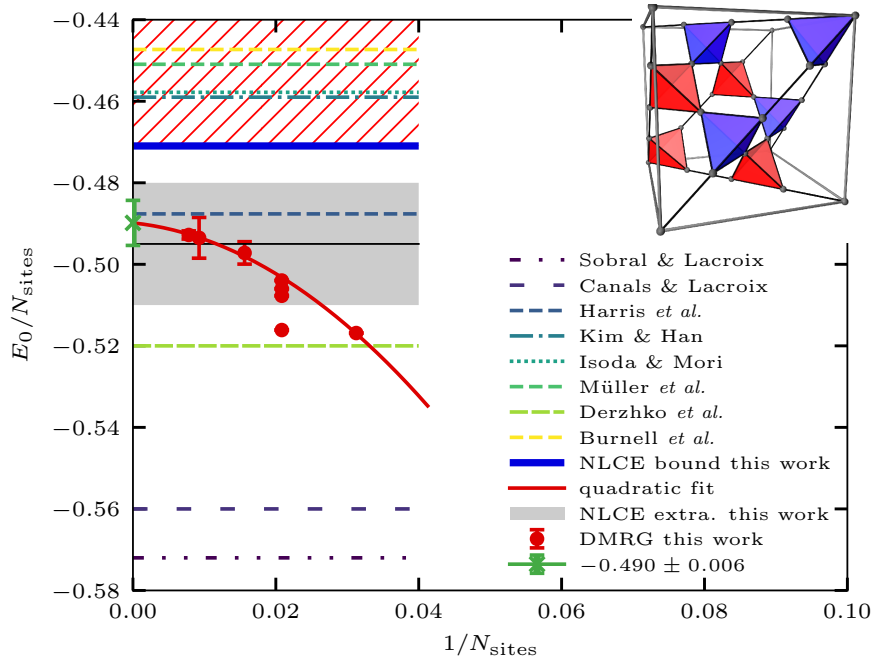


Рис. 3.13. Ілюстрація, що доповнює таблицю 3.2, див. підпис до табл. 3.2. Рисунок взято із [15].

### 3.5. Висновки

У цьому розділі ми дослідили термодинамічну поведінку  $S = 1/2$  феромагнетика [30] і антиферомагнетика [31] Гайзенберга на гратці пірохлору. В обох випадках спостерігається значний вплив геометричної фрустрації на поведінку системи при скінченних температурах. Наприклад, у випадку феромагнетика геометрична фрустрація приводить до пониження критичної температури  $T_c$  у порівнянні із простою кубічною граткою на приблизно 15%. Для антиферомагнетика сильна геометрична фрустрація запобігає будь-якому магнітному впорядкуванню при довільних температурах. Пологий максимум теплоємності розташований при  $T \simeq 0.25$ , що не є типовим для досліджених досі квантових фрустрованих антиферомагнетиків. Результати цього розділу опубліковані у статтях [30, 31].

## РОЗДІЛ 4

# ОСНОВНІ ПОЛОЖЕННЯ ДИСЕРТАЦІЇ

У дисертаційній роботі розглядались декоровані фрустровані класичні і класично–квантові одновимірні системи. Із аналізу точних результатів, отриманих методом матриці переносу, встановлено причину аномальної поведінки ентропії, теплоємності і магнітної сприйнятливості при скінченній температурі  $T_p$ . Інша група задач стосується термодинамічна поведінки квантового  $S = 1/2$  феромагнетика і антиферомагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору. Для аналізу термодинаміки цих систем використовувались метод двочасових функцій Гріна в наближенні хаотичних фаз і метод ентропії для інтерполяції між високотемпературними розвиненнями і низькими температурами. Обчислено термодинамічні характеристики обох фрустрованих квантових спінових систем.

На основі виконаних досліджень сформулюємо ключові висновки:

- Для двонової драбинки Ізинга із тримерними щаблями збудовано ефективний гамільтоніан із залежними від температури параметрами. При певних значеннях обмінних взаємодій модель виявляє аномальну для одновимірних систем поведінку термодинамічних величин: гострий пік у температурній залежності кореляційної довжини, теплоємності і магнітної сприйнятливості, а також стрибкоподібна поведінка ентропії і внутрішньої енергії при скінченній температурі  $T_p$ . Аналіз ефективної моделі показує, що ці особливості пов'язані із «розщепленням» драбинки на два невзаємодіючих ланцюжки Ізинга, а гострі піки у спостережуваних величинах пов'язані із критичною поведінкою простого ланцюжка Ізинга у нульовому полі коли,  $T \rightarrow 0$ . Пояснено квазікритичну поведінку цієї моделі.

- Схожа незвична низькотемпературна поведінка спостерігалася і для низки декорованих одновимірних ланцюжків Ізинга. На прикладі спін-1/2 Ізинг-XYZ ромбічного ланцюжка, спін-1/2 Ізинг-Гайзенбергового ланцюжка подвійних тетраедрів і подвійного ланцюжка із локалізованими спінами Ізинга і електронами показано, що при розгляді ефективної моделі для кожної з цих систем виникають залежні від температури обмінні взаємодії і поля. Із аналізу температурної поведінки цих величин встановлено, що незвична низькотемпературна поведінка виникає під час зміни знаку ефективного поля і пов'язана із критичною поведінкою простого ланцюжка Ізинга. Досліджено квазікритичну поведінку цієї моделі. Квазікритичні показники збігаються із отриманими для двоногої драбинки Ізинга.
- Методом двочасових функцій Гріна обчислено термодинамічні і динамічні функції квантової  $S = 1/2$  феромагнітної моделі Гайзенберга на гратці пірохлору. Знайдено значення критичної температури  $T_c$  переходу від впорядкованої (феромагнітної) фази до неупорядкованої (парамагнітної) фази. Отримані результати для намагніченості і теплоємності нижче критичної температури, а також однорідної магнітної сприйнятливості вище критичної температури  $T_c$  дають добрий опис термодинаміки цієї моделі. Обчислений динамічний структурний фактор узгоджується із виміряним у експериментах з непружного розсіяння нейтронів для сполуки  $\text{Li}_4\text{V}_2\text{O}_7$ .
- Термодинаміку квантової  $S = 1/2$  антиферомагнітної моделі Гайзенберга на гратці пірохлору досліджено методом ентропії. Виявлено, що пологий максимум теплоємності  $c(T)$  цієї системи розташований при досить низьких температурах  $T/J \simeq 0.25$ . Магнітна сприйнятливість  $\chi(T)$  має типовий для антиферомагнетиків широкий максимум із ненульовим значенням в основному стані. Дослідження методом ентропії дають підстави вважати, що спектр системи безщілинний, а низькотемпературна поведінка теплоємності пропорційна квадрату температури  $c \propto T^2$ . Передбачене значення енергії основного стану  $e_0/J = -0.52$ .

## ПОДЯКИ

Автор висловлює подяку всім співавторам, з якими виконувалися включені в дисертаційну роботу дослідження. Особливо вдячний Тарасу Крохмальському і Олегу Держку за можливість навчатися в них впродовж часу в аспірантурі, а також за безцінні розмови і поради.

Автор також дякує Тарасу Верхоляку за критичні зауваження до рукопису дисертації.

Частина дисертаційної роботи виконувалася за підтримки стипендії Львівської обласної ради (2018 р.), проекту Державного фонду фундаментальних досліджень “Ефекти фрустрації у квантових спінових системах” (2019 р.) і стипендії НАН України для молодих вчених (2019–2021 рр.).

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Balents L.* Spin liquids in frustrated magnets // *Nature*. 2010. Vol. 464. P. 199–208.
2. *Zvyagin A. A.* New physics in frustrated magnets: Spin ices, monopoles, etc. (Review Article) // *Low Temperature Physics*. 2013. Vol. 39, no. 11. P. 901–922.
3. *Savary L., Balents L.* Quantum spin liquids: a review // *Reports on Progress in Physics*. 2016. Vol. 80, no. 1. P. 016502.
4. *Knolle J., Moessner R.* A Field Guide to Spin Liquids // *Annual Review of Condensed Matter Physics*. 2019. Vol. 10, no. 1. P. 451–472.
5. Quantum spin liquids / C. Broholm, R. J. Cava, S. A. Kivelson, D. G. Nocera, M. R. Norman, T. Senthil // *Science*. 2020. Vol. 367, no. 6475.
6. Experimental identification of quantum spin liquids / J. Wen, S.-L. Yu, S. Li, W. Yu, J.-X. Li // *npj Quantum Materials*. 2019. Vol. 4. P. 2397–4648.
7. *Zhou Y., Kanoda K., Ng T.-K.* Quantum spin liquid states // *Rev. Mod. Phys.* 2017. Vol. 89. P. 025003.
8. *Kitaev A.* Anyons in an exactly solved model and beyond // *Annals of Physics*. 2006. Vol. 321, no. 1. P. 2–111. January Special Issue.
9. *Sandvik A. W.* Computational Studies of Quantum Spin Systems // *AIP Conference Proceedings*. 2010. Vol. 1297, no. 1. P. 135–338.
10. *Troyer M., Wiese U.-J.* Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 170201.
11. *Schnack J., Schulenburg J., Richter J.* Magnetism of the  $N = 42$  kagome lattice antiferromagnet // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 094423.



12. *Läuchli A. M., Sudan J., Moessner R.*  $S = \frac{1}{2}$  kagome Heisenberg antiferromagnet revisited // *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 100. P. 155142.
13. *Yan S., Huse D. A., White S. R.* Spin-Liquid Ground State of the  $s = 1/2$  Kagome Heisenberg Antiferromagnet // *Science*. 2011. Vol. 332, no. 6034. P. 1173–1176.
14. *Depenbrock S., McCulloch I. P., Schollwöck U.* Nature of the Spin-Liquid Ground State of the  $S = 1/2$  Heisenberg Model on the Kagome Lattice // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 067201.
15. Possible Inversion Symmetry Breaking in the  $S = 1/2$  Pyrochlore Heisenberg Magnet / I. Hagymási, R. Schäfer, R. Moessner, D. J. Luitz // *Phys. Rev. Lett.* 2021. Vol. 126. P. 117204.
16. *Hagymási I., Schäfer R., Moessner R., Luitz D. J.* Magnetization process and ordering of the  $S = 1/2$  pyrochlore magnet in a field. 2021. arXiv : 2106.09722.
17. *Syôzi I.* Transformations of Ising Models // Phase Transitions and Critical Phenomena: Exact Results / Ed. by C. Domb, M. S. Green. London : Academic Press, 1972. Vol. 1. P. 270–231.
18. Correlation functions for a spin-1/2 Ising-XYZ diamond chain: Further evidence for quasi-phases and pseudo-transitions / I. M. Carvalho, J. Torrico, S. M. de Souza, O. Rojas, O. Derzhko // *Annals of Physics*. 2019. Vol. 402. P. 45–65.
19. *Rojas O.* A Conjecture on the Relationship Between Critical Residual Entropy and Finite Temperature Pseudo-transitions of One-dimensional Models // *Brazilian Journal of Physics*. 2020. Vol. 50. P. 675–686.
20. *Gálisová L., Strečka J.* Vigorous thermal excitations in a double-tetrahedral chain of localized Ising spins and mobile electrons mimic a temperature-driven first-order phase transition // *Phys. Rev. E*. 2015. Vol. 91. P. 022134.
21. Exchange Coupling and Energy-Level Crossing in a Magnetic Chain  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  Evaluated by High-Frequency Electron Paramagnetic Resonance / A. Okazawa, H. Nojiri, T. Nogami, T. Ishida // *Chemistry of Materials*. 2008. Vol. 20. P. 3110–3119.

22. *Strečka J., Gálisová L., Verkholyak T.* Insights into nature of a magnetization plateau of  $3d-4f$  coordination polymer  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  from a spin-1/2 Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain // *Condensed Matter Physics*. 2020. Vol. 23. P. 43708.
23. *Van den Heuvel W., Chibotaru L. F.* Dysprosium-based experimental representatives of an Ising-Heisenberg chain and a decorated Ising ring // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 82. P. 174436.
24. Universality and quasicritical exponents of one-dimensional models displaying a quasitransition at finite temperatures / O. Rojas, J. Strečka, M. L. Lyra, S. M. de Souza // *Phys. Rev. E*. 2019. Vol. 99. P. 042117.
25. Quantum entanglement in the neighborhood of pseudo-transition for a spin-1/2 Ising-XYZ diamond chain / I. M. Carvalho, J. Torrico, S.M. de Souza, M. Rojas, O. Rojas // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2018. Vol. 465. P. 323–327.
26. *Yin W.* Finding and classifying an infinite number of cases of the marginal phase transition in one-dimensional Ising models. 2020. arXiv : 2006.15087.
27. *Yin W.* Frustration-driven unconventional phase transitions at finite temperature in a one-dimensional ladder Ising model. 2020. arXiv : 2006.08921.
28. *Astrakhantsev N., Westerhout T., Tiwari A., Choo K., Chen A., Fischer M. H., Carleo G., Neupert T.* Broken-Symmetry Ground States of the Heisenberg model on the Pyrochlore Lattice. 2021. arXiv : 2101.08787.
29. *Bernu B., Lhuillier C.* Spin Susceptibility of Quantum Magnets from High to Low Temperatures // *Phys. Rev. Lett.* 2015. Vol. 114. P. 057201.
30. The spin-1/2 Heisenberg ferromagnet on the pyrochlore lattice: A Green's function study / T. Hutak, P. Müller, J. Richter, T. Krokhumalskii, O. Derzhko // *Condensed Matter Physics*. 2018. Vol. 21. P. 1–13.
31. Adapting Planck's route to investigate the thermodynamics of the spin-half pyrochlore Heisenberg antiferromagnet / O. Derzhko, T. Hutak, T. Krokhumalskii, J. Schnack, J. Richter // *Phys. Rev. B*. 2020. Vol. 101. P. 174426.
32. Low-temperature thermodynamics of the two-leg ladder Ising model with

- trimer rungs: A mystery explained / T. Hutak, T. Krokhmalkii, O. Rojas, S. M. de Souza, O. Derzhko // *Physics Letters A*. 2021. Vol. 387. P. 127020.
33. Towards low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains / T. Krokhmalkii, T. Hutak, O. Rojas, S. M. de Souza, O. Derzhko // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2021. Vol. 573. P. 125986.
34. *Pauling L.* The Structure and Entropy of Ice and of Other Crystals with Some Randomness of Atomic Arrangement // *Journal of the American Chemical Society*. 1935. Vol. 57, no. 12. P. 2680–2684.
35. *Wannier G. H.* Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net // *Phys. Rev.* 1950. Vol. 79. P. 357–364.
36. *Syôzi I.* Statistics of Kagomé Lattice // *Progress of Theoretical Physics*. 1951. Vol. 6. P. 306–308.
37. *Takahashi M.* Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models. Cambridge University Press, 2005.
38. *Zvyagin A.* Quantum theory of one-dimensional spin systems. Cambridge: Cambridge Scientific Publ., 2010.
39. *Bethe H.* Zur Theorie der Metalle // *Zeitschrift für Physik*. 1931. Vol. 71, no. 3. P. 205–226.
40. *Mermin N. D., Wagner H.* Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // *Phys. Rev. Lett.* 1966. Vol. 17. P. 1133–1136.
41. *Anderson P. W.* An Approximate Quantum Theory of the Antiferromagnetic Ground State // *Phys. Rev.* 1952. Vol. 86. P. 694–701.
42. *Anderson P.* Resonating valence bonds: A new kind of insulator? // *Materials Research Bulletin*. 1973. Vol. 8, no. 2. P. 153–160.
43. *Fazekas P., Anderson P. W.* On the ground state properties of the anisotropic triangular antiferromagnet // *The Philosophical Magazine: A Journal of Theoretical Experimental and Applied Physics*. 1974. Vol. 30, no. 2. P. 423–440.
44. *Anderson P. W.* The Resonating Valence Bond State in  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and Super-

- conductivity // *Science*. 1987. Vol. 235, no. 4793. P. 1196–1198.
45. *Baskaran G., Zou Z., Anderson P. W.* The resonating valence bond state and high- $T_c$  superconductivity – A mean field theory // *Solid State Communications*. 1987. Vol. 63, no. 11. P. 973–976.
  46. *Manousakis E.* The spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides // *Rev. Mod. Phys.* 1991. Vol. 63. P. 1–62.
  47. *Zhitomirsky M. E., Chernyshev A. L.* Colloquium: Spontaneous magnon decays // *Rev. Mod. Phys.* 2013. Vol. 85. P. 219–242.
  48. *Chernyshev A. L., Zhitomirsky M. E.* Order and excitations in large –  $S$  kagome-lattice antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 92. P. 144415.
  49. *Bernu B., Lhuillier C., Pierre L.* Signature of Néel order in exact spectra of quantum antiferromagnets on finite lattices // *Phys. Rev. Lett.* 1992. Vol. 69. P. 2590–2593.
  50. Order versus disorder in the quantum Heisenberg antiferromagnet on the kagomé lattice using exact spectra analysis / P. Lecheminant, B. Bernu, C. Lhuillier, L. Pierre, P. Sindzingre // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. P. 2521–2529.
  51. *Capriotti L., Trumper A. E., Sorella S.* Long-Range Néel Order in the Triangular Heisenberg Model // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 82. P. 3899–3902.
  52. Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice with arbitrary spin: A higher-order coupled cluster treatment / O. Götze, D. J. J. Farnell, R. F. Bishop, P. H. Y. Li, J. Richter // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 84. P. 224428.
  53. *Changlani H. J., Läuchli A. M.* Trimerized ground state of the spin-1 Heisenberg antiferromagnet on the kagome lattice // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 91. P. 100407.
  54. Macroscopically Degenerate Exactly Solvable Point in the Spin-1/2 Kagome Quantum Antiferromagnet / H. J. Changlani, D. Kochkov, K. Kumar, B. K. Clark, E. Fradkin // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. P. 117202.
  55. Resonating quantum three-coloring wave functions for the kagome quantum

- antiferromagnet / H. J. Changlani, S. Pujari, C.-M. Chung, B. K. Clark // *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 99. P. 104433.
56. Flat-band physics in the spin-1/2 sawtooth chain / O. Derzhko, J. Schnack, D. V. Dmitriev, V. Ya. Krivnov, J. Richter // *European Physical Journal B*. 2020. Vol. 93, no. 8. P. 161.
57. Norman M. R. Colloquium: Herbertsmithite and the search for the quantum spin liquid // *Rev. Mod. Phys.* 2016. Vol. 88. P. 041002.
58. Octa-Kagomé Lattice Compounds Showing Quantum Critical Behaviors: Spin Gap Ground State versus Antiferromagnetic Ordering / Y. Tang, C. Peng, W. Guo, J. Wang, G. Su, Z. He // *Journal of the American Chemical Society*. 2017. Vol. 139, no. 40. P. 14057–14060.
59. Gapless spin liquid in a square-kagome lattice antiferromagnet / M. Fujihala, K. Morita, R. Mole, S. Mitsuda, T. Tohyama, S. Yano, D. Yu, S. Sota, T. Kuwai, A. Koda, H. Okabe, H. Lee, S. Itoh, T. Hawaii, T. Masuda, H. Sagayama, A. Matsuo, K. Kindo, S. Ohira-Kawamura, K. Nakajima // *Nature Communications*. 2020. Vol. 11. P. 2041–1723.
60. Hydrothermal Synthesis and a Composite Crystal Structure of  $\text{Na}_6\text{Cu}_7\text{BiO}_4(\text{PO}_4)_4[\text{Cl},(\text{OH})]_3$  as a Candidate for Quantum Spin Liquid / O.V. Yakubovich, L. V. Shvanskaya, G. V. Kiriukhina, A. S. Volkov, O. V. Dimitrova, A. N. Vasiliev // *Inorganic Chemistry*. 2021. Vol. 60, no. 15. P. 11450–11457.
61. Quantum phases of  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$  from High-Pressure Thermodynamics / J. Guo, G. Sun, B. Zhao, L. Wang, W. Hong, V. A. Sidorov, N. Ma, Q. Wu, S. Li, Z. Y. Meng, A. W. Sandvik, L. Sun // *Phys. Rev. Lett.* 2020. Vol. 124. P. 206602.
62. Yang J., Sandvik A. W., Wang L. Quantum Criticality and Spin Liquid Phase in the Shastry-Sutherland model. 2021. 2104.08887.
63. Thermodynamic properties of the Shastry-Sutherland model from quantum Monte Carlo simulations / S. Wessel, I. Niesen, J. Stapmanns, B. Normand, F. Mila, P. Corboz, A. Honecker // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 174432.

64. Thermodynamic properties of the Shastry-Sutherland model throughout the dimer-product phase / A. Wietek, P. Corboz, S. Wessel, B. Normand, F. Mila, A. Honecker // *Phys. Rev. Research*. 2019. Vol. 1. P. 033038.
65. *Nishimoto S., Shibata N., Hotta C.* Controlling frustrated liquids and solids with an applied field in a kagome Heisenberg antiferromagnet // *Nature Communications*. 2013. Vol. 4. P. 2287.
66. *Stoudenmire E., White S. R.* Studying Two-Dimensional Systems with the Density Matrix Renormalization Group // *Annual Review of Condensed Matter Physics*. 2012. Vol. 3, no. 1. P. 111–128.
67. *Kondo J., Yamaji K.* Green's-Function Formalism of the One-Dimensional Heisenberg Spin System // *Progress of Theoretical Physics*. 1972. 03. Vol. 47, no. 3. P. 807–818.
68. *Shimahara H., Takada S.* Green's Function Theory of the Two-Dimensional Heisenberg Model-Spin Wave in Short Range Order // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1991. Vol. 60, no. 7. P. 2394–2405.
69. *Winterfeldt S., Ihle D.* Theory of antiferromagnetic short-range order in the two-dimensional Heisenberg model // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. P. 5535–5541.
70. *Siurakshina L., Ihle D., Hayn R.* Magnetic order and finite-temperature properties of the two-dimensional frustrated Heisenberg model // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 64. P. 104406.
71. *Bernhard B. H., Canals B., Lacroix C.* Green's function approach to the magnetic properties of the kagomé antiferromagnet // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. P. 104424.
72. Green-function theory of the Heisenberg ferromagnet in a magnetic field / I. Junger, D. Ihle, J. Richter, A. Klümper // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. P. 104419.
73. *Schmalfuß D., Richter J., Ihle D.* Green's function theory of quasi-two-dimensional spin-half Heisenberg ferromagnets: Stacked square versus stacked kagomé lattices // *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 72. P. 224405.



74. Thermodynamics of low-dimensional spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg ferromagnets in an external magnetic field within a Green function formalism / T. N. Antsygina, M. I. Poltavskaya, I. I. Poltavsky, K. A. Chishko // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 024407.
75. Square lattice hard-core bosons within the random phase approximation / T. N. Antsygina, M. I. Poltavskaya, I. I. Poltavsky, K. A. Chishko // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 174511.
76. Thermodynamics of the one-dimensional frustrated Heisenberg ferromagnet with arbitrary spin / M. Härtel, J. Richter, D. Ihle, J. Schnack, S.-L. Drechsler // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 84. P. 104411.
77. Thermodynamics of the pyrochlore Heisenberg ferromagnet with arbitrary spin  $S$  / P. Müller, A. Lohmann, J. Richter, O. Menchyshyn, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 96. P. 174419.
78. Müller P., Zander A., Richter J. Thermodynamics of the kagome-lattice Heisenberg antiferromagnet with arbitrary spin  $S$  // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 024414.
79. Thermodynamics of the pyrochlore-lattice quantum Heisenberg antiferromagnet / P. Müller, A. Lohmann, J. Richter, O. Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 100. P. 024424.
80. Bold Diagrammatic Monte Carlo Method Applied to Fermionized Frustrated Spins / S. A. Kulagin, N. Prokof'ev, O. A. Starykh, B. Svistunov, C. N. Varney // *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. P. 070601.
81. Bold diagrammatic Monte Carlo technique for frustrated spin systems / S. A. Kulagin, N. Prokof'ev, O. A. Starykh, B. Svistunov, C. N. Varney // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 87. P. 024407.
82. Spin-Ice State of the Quantum Heisenberg Antiferromagnet on the Pyrochlore Lattice / Y. Huang, K. Chen, Y. Deng, N. Prokof'ev, B. Svistunov // *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 116. P. 177203.
83. Niggemann N., Sbierski B., Reuther J. Frustrated quantum spins at finite temperature: Pseudo-Majorana functional renormalization group approach //

- Phys. Rev. B*. 2021. Vol. 103. P. 104431.
84. *Onsager L.* Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // *Phys. Rev.* 1944. Vol. 65. P. 117–149.
85. *Houtappel R. M. F.* Order-disorder in hexagonal lattices // *Physica*. 1950. Vol. 16, no. 5. P. 425–455.
86. *Fisher M. E.* Transformations of Ising Models // *Phys. Rev.* 1959. Vol. 113. P. 969–981.
87. *Rojas O., Valverde J. S., de Souza S. M.* Generalized transformation for decorated spin models // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2009. Vol. 388, no. 8. P. 1419–1430.
88. *Strečka J.* Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical-quantum models // *Physics Letters A*. 2010. Vol. 374, no. 36. P. 3718–3722.
89. *Rojas O., de Souza S. M.* Direct algebraic mapping transformation for decorated spin models // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2011. Vol. 44, no. 24. P. 245001.
90. *Kassan-Ogly F. A., Proshkin A. I.* Ising Model on Planar Decorated Lattices. Frustrations and Their Influence on Phase Transitions // *Physics of Metals and Metallography*. 2019. Vol. 120. P. 1359–1365.
91. *Proshkin A. I., Kassan-Ogly F. A.* Frustration and Phase Transitions in Ising Model on Decorated Square Lattice // *Physics of Metals and Metallography*. 2019. Vol. 120. P. 1366–1372.
92. *Syozi I., Nakano H.* Statistical Models of Ferrimagnetism // *Progress of Theoretical Physics*. 1955. Vol. 13, no. 1. P. 69–78.
93. *Lieb E. H.* Two theorems on the Hubbard model // *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 62. P. 1201–1204.
94. Emergence of an Ising critical regime in the clustering of one-dimensional soft matter revealed through string variables / F. Mambretti, S. Molinelli, D. Pini, G. Bertaina, D. E. Galli // *Phys. Rev. E*. 2020. Vol. 102. P. 042134.
95. *Gudyma A., Gudyma I.* 1D spin-crossover molecular chain with degenerate states // *Journal of Applied Physics*. 2021. Vol. 129, no. 12. P. 123905.



96. *Gudyma A., Gudyma I.* Effect of compression in molecular spin-crossover chains // *Low Temperature Physics*. 2021. Vol. 47, no. 6. P. 457–465.
97. Effective low-energy description of almost Ising-Heisenberg diamond chain / O. Derzhko, O. Krupnitska, B. Lisnyi, J. Strečka // *Europhysics Letters*. 2015. Vol. 112, no. 3. P. 37002.
98. *Verkholyak T., Strečka J.* Modified strong-coupling treatment of a spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg trimerized chain developed from the exactly solved Ising-Heisenberg diamond chain // *Phys. Rev. B*. 2021. Vol. 103. P. 184415.
99. *Verkholyak T., Strečka J.* Fractional magnetization plateaux of a spin-1/2 Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice: effect of quantum  $XY$  interdimer coupling. 2021. arXiv : 2104.05797.
100. Zero temperature non-plateau magnetization and magnetocaloric effect in an Ising- $XYZ$  diamond chain structure / J. Torrico, M. Rojas, S. M. de Souza, O. Rojas // *Physics Letters A*. 2016. Vol. 380, no. 43. P. 3655–3660.
101. Spin frustration of a spin-1/2 Ising–Heisenberg three-leg tube as an indispensable ground for thermal entanglement / J. Strečka, R. C. Alécio, M. L. Lyra, O. Rojas // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2016. Vol. 409. P. 124–133.
102. *de Souza S. M., Rojas O.* Quasi-phases and pseudo-transitions in one-dimensional models with nearest neighbor interactions // *Solid State Communications*. 2018. Vol. 269. P. 131–134.
103. *Timonin P. N.* Spin ice in a field: Quasi-phases and pseudo-transitions // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2010. Vol. 113. P. 251.
104. Quasiphase Transition in a Single File of Water Molecules Encapsulated in (6,5) Carbon Nanotubes Observed by Temperature-Dependent Photoluminescence Spectroscopy / X. Ma, S. Cambré, W. Wenseleers, S. K. Doorn, H. Htoon // *Phys. Rev. Lett.* 2017. Vol. 118. P. 027402.
105. *Stancioli R. A., Mól L. A. S.* Intermediate phase and pseudo phase transition in an artificial spin ice model // *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 100. P. 024432.
106. *Strečka J.* Anomalous Thermodynamic Response in the Vicinity of a Pseudo-

- Transition of a Spin-1/2 Ising Diamond Chain // *Acta Physica Polonica A*. 2020. Vol. 137.
107. *Baxter R. J.* Exactly solved models in statistical mechanics. Academic Press, 1982.
108. *Strečka J.* Pseudo-Critical Behavior of Spin-1/2 Ising Diamond and Tetrahedral Chains // *An Introduction to the Ising Model* / Ed. by Samuli Luoma. New York : Nova Science Publishers, 2020. P. 63–86.
109. Low-temperature pseudo-phase-transition in an extended Hubbard diamond chain / O. Rojas, S. M. de Souza, J. Torrico, L. M. Veríssimo, M. S. S. Pereira, M. L. Lyra // *Phys. Rev. E*. 2021. Vol. 103. P. 042123.
110. *Panov Y., Rojas O.* Unconventional low-temperature features in the one-dimensional frustrated  $q$ -state Potts model // *Phys. Rev. E*. 2021. Vol. 103. P. 062107.
111. *Pimenta R. A., Rojas O., de Souza S. M.* Anomalous thermodynamics in a mixed spin-1/2 and spin-1 hexagonal nanowire system. 2021. 2108.01729.
112. *Haldane F. D. M.* Nonlinear Field Theory of Large-Spin Heisenberg Antiferromagnets: Semiclassically Quantized Solitons of the One-Dimensional Easy-Axis Néel State // *Phys. Rev. Lett.* 1983. Vol. 50. P. 1153–1156.
113. *Anderson P. W.* Ordering and Antiferromagnetism in Ferrites // *Phys. Rev.* 1956. Vol. 102. P. 1008–1013.
114. *Villain J.* Insulating spin glasses // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*. 1979. Vol. 33. P. 31–42.
115. *Moessner R., Chalker J. T.* Properties of a Classical Spin Liquid: The Heisenberg Pyrochlore Antiferromagnet // *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 2929–2932.
116. *Moessner R., Chalker J. T.* Low-temperature properties of classical geometrically frustrated antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. P. 12049–12062.
117. *Harris A. B., Berlinsky A. J., Bruder C.* Ordering by quantum fluctuations in a strongly frustrated Heisenberg antiferromagnet // *Journal of Applied Physics*.

1991. Vol. 69, no. 8. P. 5200–5202.
118. *Tsunetsugu H.* Spin-singlet order in a pyrochlore antiferromagnet // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 65. P. 024415.
119. *Tsunetsugu H.* Antiferromagnetic Quantum Spins on the Pyrochlore Lattice // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2001. Vol. 70, no. 3. P. 640–643.
120. *Isoda M., Mori S.* Valence-Bond Crystal and Anisotropic Excitation Spectrum on 3-Dimensionally Frustrated Pyrochlore // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1998. Vol. 67, no. 12. P. 4022–4025.
121. *Canals B., Lacroix C.* Pyrochlore Antiferromagnet: A Three-Dimensional Quantum Spin Liquid // *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 2933–2936.
122. *Canals B., Lacroix C.* Quantum spin liquid: The Heisenberg antiferromagnet on the three-dimensional pyrochlore lattice // *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 61. P. 1149–1159.
123. Quantum and Classical Phases of the Pyrochlore Heisenberg Model with Competing Interactions / Y. Iqbal, T. Müller, P. Ghosh, M. J. P. Gingras, H. O. Jeschke, S. Rachel, J. Reuther, R. Thomale // *Phys. Rev. X*. 2019. Vol. 9. P. 011005.
124. *Kim J. H., Han J. H.* Chiral spin states in the pyrochlore Heisenberg magnet: Fermionic mean-field theory and variational Monte Carlo calculations // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 78. P. 180410.
125. *Burnell F. J., Chakravarty S., Sondhi S. L.* Monopole flux state on the pyrochlore lattice // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 79. P. 144432.
126. Dynamical Structure Factor of the Three-Dimensional Quantum Spin Liquid Candidate  $\text{NaCaNi}_2\text{F}_7$  / S. Zhang, H. J. Changlani, K. W. Plumb, O. Tchernyshyov, R. Moessner // *Phys. Rev. Lett.* 2019. Vol. 122. P. 167203.
127. Static Critical Behavior of the Spin-Freezing Transition in the Geometrically Frustrated Pyrochlore Antiferromagnet  $\text{Y}_2\text{Mo}_2\text{O}_7$  / M. J. P. Gingras, C. V. Stager, N. P. Raju, B. D. Gaulin, J. E. Greedan // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 78. P. 947–950.
128. Glassy Statics and Dynamics in the Chemically Ordered Pyrochlore Antifer-

- romagnet  $Y_2Mo_2O_7$  / J. S. Gardner, B. D. Gaulin, S.-H. Lee, C. Broholm, N. P. Raju, J. E. Greedan // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 83. P. 211–214.
129. Successive Spin Freezing Behavior in a Pyrochlore Antiferromagnet  $Y_2Mo_2O_7$  under Magnetic Fields / K. Miyoshi, Y. Nishimura, K. Honda, K. Fujiwara, J. Takeuchi // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2000. Vol. 69, no. 11. P. 3517–3520.
130. Liquidlike correlations in single-crystalline  $Y_2Mo_2O_7$ : An unconventional spin glass / H. J. Silverstein, K. Fritsch, F. Flicker, A. M. Hallas, J. S. Gardner, Y. Qiu, G. Ehlers, A. T. Savici, Z. Yamani, K. A. Ross, B. D. Gaulin, M. J. P. Gingras, J. A. M. Paddison, K. Foyevtsova, R. Valenti, F. Hawthorne, C. R. Wiebe, H. D. Zhou // *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 89. P. 054433.
131. From Spin Glass to Quantum Spin Liquid Ground States in Molybdate Pyrochlores / L. Clark, G. J. Nilsen, E. Kermarrec, G. Ehlers, K. S. Knight, A. Harrison, J. P. Attfield, B. D. Gaulin // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 113. P. 117201.
132. Signatures of a gearwheel quantum spin liquid in a spin- $\frac{1}{2}$  pyrochlore molybdate Heisenberg antiferromagnet / Y. Iqbal, T. Müller, K. Riedl, J. Reuther, S. Rachel, R. Valentí, M. J. P. Gingras, R. Thomale, H. O. Jeschke // *Phys. Rev. Materials*. 2017. Vol. 1. P. 071201.
133. Continuum of quantum fluctuations in a three-dimensional  $S = 1$  Heisenberg magnet / K. W. Plumb, H. J. Changlani, A. Scheie, S. Zhang, J. W. Krizan, J. A. Rodriguez-Rivera, Y. Qiu, B. Winn, R. J. Cava, C. L. Broholm // *Nature Physics*. 2019. Vol. 15. P. 54–59.
134. Spin-Wave Spectrum of the Quantum Ferromagnet on the Pyrochlore Lattice  $Lu_2V_2O_7$  / M. Mena, R. S. Perry, T. G. Perring, M. D. Le, S. Guerrero, M. Storni, D. T. Adroja, Ch. Rüegg, D. F. McMorrow // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 113. P. 047202.
135. Ferromagnetism in  $CdCr_2Se_4$  and  $CdCr_2S_4$  / N. Menyuk, K. Dwight, R. J. Arnott, A. Wold // *Journal of Applied Physics*. 1966. Vol. 37, no. 3. P. 1387–1388.

136. *Wojtowicz P.* Semiconducting ferromagnetic spinels // *IEEE Transactions on Magnetism*. 1969. Vol. 5, no. 4. P. 840–848.
137. Ferromagnetic Transition of Pyrochlore Compound  $\text{Yb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$  / Y. Yasui, M. Soda, S. Iikubo, M. Ito, M. Sato, N. Hamaguchi, T. Matsushita, N. Wada, T. Takeuchi, N. Aso, K. Kakurai // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2003. Vol. 72, no. 11. P. 3014–3015.
138. *Yaresko A. N.* Electronic band structure and exchange coupling constants in  $\text{ACr}_2\text{X}_4$  spinels ( $A = \text{Zn, Cd, Hg}$ ;  $X = \text{O, S, Se}$ ) // *Phys. Rev. B*. 2008. Mar. Vol. 77. P. 115106.
139. Pseudo-Goldstone Magnons in the Frustrated  $s = 3/2$  Heisenberg Helimagnet  $\text{ZnCr}_2\text{Se}_4$  with a Pyrochlore Magnetic Sublattice / Y. V. Tymoshenko, Y. A. Onykienko, T. Müller, R. Thomale, S. Rachel, A. S. Cameron, P. Y. Portnichenko, D. V. Efremov, V. Tsurkan, D. L. Abernathy, J. Ollivier, A. Schneidewind, A. Piovano, V. Felea, A. Loidl, D. S. Inosov // *Phys. Rev. X*. 2017. Vol. 7. P. 041049.
140. Magnetic-polaron-driven magnetoresistance in the pyrochlore  $\text{Lu}_2\text{V}_2\text{O}_7$  / H. D. Zhou, E. S. Choi, J. A. Souza, J. Lu, Y. Xin, L. L. Lumata, B. S. Conner, L. Balicas, J. S. Brooks, J. J. Neumeier, C. R. Wiebe // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 020411.
141. Observation of the Magnon Hall Effect / Y. Onose, T. Ideue, H. Katsura, Y. Shiomi, N. Nagaosa, Y. Tokura // *Science*. 2010. Vol. 329, no. 5989. P. 297–299.
142. *Holstein T., Primakoff H.* Field Dependence of the Intrinsic Domain Magnetization of a Ferromagnet // *Phys. Rev.* 1940. Vol. 58. P. 1098–1113.
143. *Zubarev D. N.* DOUBLE-TIME GREEN FUNCTIONS IN STATISTICAL PHYSICS // *Soviet Physics Uspekhi*. 1960. Vol. 3, no. 3. P. 320–345.
144. *Tyablikov S. V.* Methods in the Quantum Theory of Magnetism. Plenum Press (Plenum Publishing Corporation), 1967.
145. *Majlis N.* The Quantum Theory of Magnetism. World Scientific, 2000.
146. *Fröbrich P., Kuntz P. J.* Many-body Green's function theory of Heisenberg

- films // *Physics Reports*. 2006. Vol. 432, no. 5. P. 223–304.
147. Vladimirov A. A., Ihle D., Plakida N. M. Magnetic order and spin excitations in the Kitaev-Heisenberg model on a honeycomb lattice // *Journal of Experimental and Theoretical Physics*. 2016. Vol. 122, no. 6. P. 1060–1069.
148. Mi B.-Z. Thermodynamic properties of frustrated arbitrary spin- $S$   $J_1$ – $J_2$  quantum Heisenberg antiferromagnet on the body-centered-cubic lattice in random phase approximation // *Solid State Communications*. 2016. Vol. 239. P. 20–26.
149. Sun N.-N., Wang H.-Y. The  $J_1$ – $J_2$  model on the face-centered-cubic lattices // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2018. Vol. 454. P. 176–184.
150. Wessel S. Critical entropy of quantum Heisenberg magnets on simple-cubic lattices // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 052405.
151. Lohmann A., Schmidt H.-J., Richter J. Tenth-order high-temperature expansion for the susceptibility and the specific heat of spin- $s$  Heisenberg models with arbitrary exchange patterns: Application to pyrochlore and kagome magnets // *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 89. P. 014415.
152. Menchyshyn O., Krokhmal'skii T., Derzhko O. SIMPLE-CUBIC-LATTICE SPIN-1/2 HEISENBERG MODEL WITHIN GREEN-FUNCTION METHOD. 2014. Preprint of the Institute for Condensed Matter Physics : ICMP-14-01E.
153. Juhász Junger I., Ihle D., Richter J. Thermodynamics of layered Heisenberg magnets with arbitrary spin // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 064425.
154. Zubarev D. N., Tserkovnikov Y. A. The method of Green's two-time temperature functions in equilibrium and nonequilibrium statistical mechanics // *Theoretical and mathematical physics*. 1986. Vol. 175. P. 134–177.
155. Magnon specific heat of high- $T_C$  parent compounds  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  and  $\text{YBa}_2\text{Cu}_3\text{O}_6$ : Green's function approach / M. S. Rutonjski, S. M. Radošević, Milan R. Pantić, Milica V. Pavkov-Hrvojević, Darko V. Kapor, Mario G. Škrinjar // *Solid State Communications*. 2011. Vol. 151, no. 7. P. 518–522.
156. Le Guillou J. C., Zinn-Justin J. Critical exponents from field theory // *Phys. Rev. B*. 1980. Vol. 21. P. 3976–3998.



157. *Holm C., Janke W.* Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study // *Phys. Rev. B.* 1993. Vol. 48. P. 936–950.
158. *Holm C., Janke W.* Critical Exponents of the Classical Heisenberg Ferromagnet // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 78. P. 2265–2265.
159. *de Souza A. J. F., Costa U. M. S., Lyra M. L.* Critical behavior of the  $S = 1/2$  Heisenberg ferromagnet: A Handscomb quantum Monte Carlo study // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 62. P. 8909–8914.
160. *Rushbrook G. S., Baker Jr. G. A., Wood P. J.* Heisenberg model // *Phase Transitions and Critical Phenomena: Series Expansions for Lattice Models /* Ed. by C. Domb, M. S. Green. London : Academic Press, 1974. Vol. 3. P. 246–256.
161. *Opechowski W.* On the exchange interaction in magnetic crystals // *Physica.* 1937. Vol. 4, no. 2. P. 181–199.
162. Effect of perturbations on the kagome  $S = \frac{1}{2}$  antiferromagnet at all temperatures / B. Bernu, L. Pierre, K. Essafi, L. Messio // *Phys. Rev. B.* 2020. Vol. 101. P. 140403.
163. *Bernu B., Misguich G.* Specific heat and high-temperature series of lattice models: Interpolation scheme and examples on quantum spin systems in one and two dimensions // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63. P. 134409.
164. *Misguich G., Bernu B.* Specific heat of the  $S = \frac{1}{2}$  Heisenberg model on the kagome lattice: High-temperature series expansion analysis // *Phys. Rev. B.* 2005. Vol. 71. P. 014417.
165. Emergent Potts order in the kagome  $J_1 - J_3$  Heisenberg model / V. Grison, P. Viot, B. Bernu, L. Messio // *Phys. Rev. B.* 2020. Vol. 102. P. 214424.
166. *Schmidt H.-J., Lohmann A., Richter J.* Eighth-order high-temperature expansion for general Heisenberg Hamiltonians // *Phys. Rev. B.* 2011. Vol. 84. P. 104443.
167. Access mode: <https://wasd.urz.uni-magdeburg.de/jschulen/HTE/>.
168. *Sobral R. R., Lacroix C.* Order by disorder in the pyrochlore antiferromag-

- nets // *Solid State Communications*. 1997. Vol. 103, no. 7. P. 407–409.
169. Koga A., Kawakami N. Frustrated Heisenberg antiferromagnet on the pyrochlore lattice // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 63. P. 144432.
170. Chandra V. R., Sahoo J. Spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnet on the pyrochlore lattice: An exact diagonalization study // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97. P. 144407.
171. Murayama H., Tominaga T., Asaba T., de Oliveira Silva A., Sato Y., Suzuki H., Ukai Y., Suetsugu S., Kasahara Y., Okuma R., Kimchi I., Matsuda Y. Universal scaling of the specific heat in  $S = 1/2$  quantum kagome antiferromagnet herbertsmithite. 2021. 2106.07223.
172. Pyrochlore  $S = \frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnet at finite temperature / R. Schäfer, I. Hagymási, R. Moessner, D. J. Luitz // *Phys. Rev. B*. 2020. Vol. 102. P. 054408.



## ДОДАТОК А

### ДЕТАЛІ ДЕЯКИХ ОБЧИСЛЕНЬ У НАБЛИЖЕННІ ТЯБЛІКОВА

#### А.1. Наближення середнього поля

В наближенні середнього поля оператори спіну записуємо так:  $\mathbf{S} \rightarrow \langle \mathbf{S} \rangle + (\mathbf{S} - \langle \mathbf{S} \rangle)$ . Тому із врахуванням лише лінійних членів за флуктуаціями  $(\mathbf{S} - \langle \mathbf{S} \rangle)$ , гамільтоніан (3.1) набуває вигляду

$$\mathcal{H}_{\text{MF}} = -3NJ\langle S^z \rangle^2 + 6J\langle S^z \rangle \sum_{\mathbf{m}} (S_{\mathbf{m};1}^z + S_{\mathbf{m};2}^z + S_{\mathbf{m};3}^z + S_{\mathbf{m};4}^z). \quad (\text{A.1})$$

Для гамільтоніану (A.1) вдається одразу ж на першому кроці отримати замкнену систему рівнянь для функцій Гріна (3.13)

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = 2\langle S^z \rangle \delta_{\alpha\beta} - 6J\langle S^z \rangle G_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.2})$$

Розв'язком системи (A.2) буде

$$G_{\alpha\beta}(\omega) = \frac{2J\langle S^z \rangle \delta_{\alpha\beta}}{\omega + 6J\langle S^z \rangle}. \quad (\text{A.3})$$

Після застосування спектральної теореми, отримаємо корелятор  $\langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle$  (для порівняння див. вирази (3.16) і (3.17))

$$\langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle = \frac{2J\langle S^z \rangle \delta_{\alpha\beta}}{e^{6|J|\langle S^z \rangle/T} - 1}. \quad (\text{A.4})$$

Із тотожності  $S^z = 1/2 - S^- S^+$  отримаємо самоузгоджене рівняння для намагніченості  $\langle S^z \rangle$  в наближенні середнього поля (для порівняння див. (3.19))

$$1 = 2\langle S^z \rangle \coth \frac{3|J|\langle S^z \rangle}{T}. \quad (\text{A.5})$$

Запишемо праву частину рівняння (A.5) як  $2\langle S^z \rangle / \text{th}(3|J|\langle S^z \rangle) / T$  і розкладемо за степенями  $\langle S^z \rangle$ . Звідси значення критичної температури  $T_c = 3|J|/2$ .

З тих ж міркувань, як і при виведенні сприйнятливості у парамагнітній фазі в основному тексті (див. обговорення для формули (3.22)), отримаємо  $\chi_{\text{MF}}$

$$\chi_{\text{MF}}^{-1} = 4(T_c - T). \quad (\text{A.6})$$

Внутрішня енергія

$$e_{\text{MF}} = \frac{\langle \mathcal{H} \rangle_{\text{MF}}}{N} = -3|J|\langle S^z \rangle^2 \quad (\text{A.7})$$

дає теплоємність  $c_{\text{MF}} = \partial e_{\text{MF}} / \partial T$ .

Кількість найближчих сусідів для простої кубічної ґратки і ґратки пірохлору однакова. Тому в наближенні середнього поля всі спостережувані величини для них також однакові. Порівняння намагніченості на вузол  $m = \langle S^z \rangle$  (A.5) і магнітної сприйнятливості в парамагнітній фазі (A.6), а також теплоємності  $c_{\text{MF}} = \partial e_{\text{MF}} / \partial T$  із відповідними величинами в наближенні Тяблікова зображено на рис. 3.4 і рис. 3.5 в основному тексті.

## A.2. Рівняння руху для двочасових функцій в наближенні Тяблікова

Для того, щоб знайти рівняння руху для функцій Гріна нам потрібно обчислити комутатори  $[S_{\mathbf{m};\alpha}^+, \mathcal{H}]$ . Для випадку  $\alpha = 1$  маємо:

$$\begin{aligned} \frac{[S_{\mathbf{m};1}^+, \mathcal{H}]}{J} &= \sum_{\mathbf{n}} \left[ S_{\mathbf{m};1}^+ \frac{S_{\mathbf{n};1}^-}{2} (S_{\mathbf{n};2}^+ + S_{\mathbf{n};3}^+ + S_{\mathbf{n};4}^+) + S_{\mathbf{n};1}^z (S_{\mathbf{n};2}^z + S_{\mathbf{n};3}^z + S_{\mathbf{n};4}^z) \right. \\ &+ \left. \frac{S_{\mathbf{n};1}^-}{2} (S_{n_1-1;2}^+ + S_{n_2-1;3}^+ + S_{n_3-1;4}^+) + S_{\mathbf{n};1}^z (S_{n_1-1;2}^z + S_{n_2-1;3}^z + S_{n_3-1;4}^z) \right] \quad (\text{A.8}) \\ &= S_{\mathbf{m};1}^z (S_{\mathbf{m};2}^+ + S_{\mathbf{m};3}^+ + S_{\mathbf{m};4}^+) - S_{\mathbf{m};1}^+ (S_{\mathbf{m};2}^z + S_{\mathbf{m};3}^z + S_{\mathbf{m};4}^z) \\ &+ S_{\mathbf{m};1}^z (S_{m_1-1;2}^+ + S_{m_2-1;3}^+ + S_{m_3-1;4}^+) - S_{\mathbf{m};1}^+ (S_{m_1-1;2}^z + S_{m_2-1;3}^z + S_{m_3-1;4}^z). \end{aligned}$$

В наближенні Тяблікова [144]  $S_A^z S_B^+ \rightarrow \langle S^z \rangle S_B^+$  (тут  $A$  і  $B$  вузлові індекси, а середнє  $\langle S^z \rangle$  не залежить від положення вузла). Після Фур'є перетворення виразу (A.8)

маємо

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{\mathbf{m}}} [S_{\mathbf{m};1}^+, \mathcal{H}] \rightarrow -2J\langle S^z \rangle (3S_{\mathbf{q};1}^+ - \phi_1 S_{\mathbf{q};2}^+ - \phi_2 S_{\mathbf{q};3}^+ - \phi_3 S_{\mathbf{q};3}^+); \quad (\text{A.9})$$

для означення функцій  $\phi_a$  див. рівняння (3.6). Тепер згідно (3.13) перший рядок матриці функцій Гріна  $\mathbb{G}$  виглядатиме так:

$$\omega G_{1;\beta}(\omega) = 2\langle S^z \rangle \delta_{1,\beta} - 2J\langle S^z \rangle [3G_{1;\beta}(\omega) - \phi_1 G_{2;\beta}(\omega) - \phi_2 G_{3;\beta}(\omega) - \phi_3 G_{4;\beta}(\omega)]. \quad (\text{A.10})$$

Тепер нам потрібно зробити такі ж обчислення і для значень  $\alpha = 2, 3, 4$ . Наведемо відповідні вирази без детальних коментарів. Для випадку  $\alpha = 2$  маємо:

$$\begin{aligned} \frac{[S_{\mathbf{m};2}^+, \mathcal{H}]}{J} &= \sum_{\mathbf{n}} \left[ S_{\mathbf{m};2}^+, \frac{S_{\mathbf{n};2}^-}{2} (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{\mathbf{n};3}^+ + S_{\mathbf{n};4}^+) + S_{\mathbf{n};2}^z (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{\mathbf{n};3}^z + S_{\mathbf{n};4}^z) \right. \\ &+ \left. \frac{S_{n_1-1;2}^-}{2} (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{n_2-1;3}^+ + S_{n_3-1;4}^+) + S_{n_1-1;2}^z (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{n_2-1;3}^z + S_{n_3-1;4}^z) \right] \\ &= S_{\mathbf{m};2}^z (S_{\mathbf{m};1}^+ + S_{\mathbf{m};3}^+ + S_{\mathbf{m};4}^+) - S_{\mathbf{m};2}^+ (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{\mathbf{n};3}^z + S_{\mathbf{n};4}^z) + S_{\mathbf{m};2}^z (S_{m_1+1;1}^+ \\ &+ S_{m_1+1,m_2-1;3}^+ + S_{m_1+1,m_3-1;4}^+) - S_{\mathbf{m};2}^+ (S_{m_1+1;1}^z + S_{m_1+1,m_2-1;3}^z + S_{m_1+1,m_3-1;4}^z). \end{aligned} \quad (\text{A.11})$$

Після Фур'є перетворення вираз (A.11) набуває вигляду:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{\mathbf{m}}} [S_{\mathbf{m};2}^+, \mathcal{H}] \rightarrow -2J\langle S^z \rangle (-\phi_1^* S_{\mathbf{q};1}^+ + 3S_{\mathbf{q};2}^+ - \phi_{12}^* S_{\mathbf{q};3}^+ - \phi_{13}^* S_{\mathbf{q};4}^+); \quad (\text{A.12})$$

тоді другий рядок матриці функцій Гріна  $\mathbb{G}$  виглядатиме так:

$$\omega G_{2;\beta}(\omega) = 2\langle S^z \rangle \delta_{2,\beta} - 2J\langle S^z \rangle [-\phi_1^* G_{1;\beta}(\omega) + 3G_{2;\beta}(\omega) - \phi_{12}^* G_{3;\beta}(\omega) - \phi_{13}^* G_{4;\beta}(\omega)]. \quad (\text{A.13})$$

Для випадку  $\alpha = 3$  маємо:

$$\begin{aligned} \frac{[S_{\mathbf{m};3}^+, \mathcal{H}]}{J} &= \sum_{\mathbf{n}} \left[ S_{\mathbf{m};3}^+, \frac{S_{\mathbf{n};3}^-}{2} (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{\mathbf{n};2}^+ + S_{\mathbf{n};4}^+) + S_{\mathbf{n};3}^z (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{\mathbf{n};2}^z + S_{\mathbf{n};4}^z) \right. \\ &+ \left. \frac{S_{n_2-1;3}^-}{2} (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{n_1-1;2}^+ + S_{n_3-1;4}^+) + S_{n_2-1;3}^z (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{n_1-1;2}^z + S_{n_3-1;4}^z) \right] \\ &= S_{\mathbf{m};3}^z (S_{\mathbf{m};1}^+ + S_{\mathbf{m};2}^+ + S_{\mathbf{m};4}^+) - S_{\mathbf{m};3}^+ (S_{\mathbf{m};1}^z + S_{\mathbf{m};2}^z + S_{\mathbf{m};4}^z) + S_{\mathbf{m};3}^z (S_{m_2+1;1}^+ \\ &+ S_{m_1-1,m_2+1;2}^+ + S_{m_2+1,m_3-1;4}^+) - S_{\mathbf{m};3}^+ (S_{m_2+1;1}^z + S_{m_1-1,m_2+1;2}^z + S_{m_2+1,m_3-1;4}^z). \end{aligned} \quad (\text{A.14})$$

Після Фур'є перетворення вираз (A.14) набуває вигляду:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{\mathbf{m}}} [S_{\mathbf{m};3}^+, \mathcal{H}] \rightarrow -2J\langle S^z \rangle (-\phi_2^* S_{\mathbf{q};1}^+ - \phi_{12} S_{\mathbf{q};2}^+ + 3S_{\mathbf{q};3}^+ - \phi_{23}^* S_{\mathbf{q};4}^+); \quad (\text{A.15})$$

тоді третій рядок матриці функцій Гріна  $\mathbb{G}$  виглядатиме так:

$$\omega G_{3;\beta}(\omega) = 2\langle S^z \rangle \delta_{3,\beta} - 2J\langle S^z \rangle [-\phi_2^* G_{1;\beta}(\omega) - \phi_{12} G_{2;\beta}(\omega) + 3G_{3;\beta}(\omega) - \phi_{23}^* G_{4;\beta}(\omega)]. \quad (\text{A.16})$$

Для випадку  $\alpha = 4$  маємо:

$$\begin{aligned} \frac{[S_{\mathbf{m};4}^+, \mathcal{H}]}{J} &= \sum_{\mathbf{n}} \left[ S_{\mathbf{m};4}^+, \frac{S_{\mathbf{n};4}^-}{2} (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{\mathbf{n};2}^+ + S_{\mathbf{n};3}^+) + S_{\mathbf{n};4}^z (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{\mathbf{n};2}^z + S_{\mathbf{n};3}^z) \right. \\ &\quad \left. + \frac{S_{n_3-1;4}^-}{2} (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{n_1-1;2}^+ + S_{n_2-1;3}^+) + S_{n_3-1;4}^z (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{n_1-1;2}^z + S_{n_2-1;3}^z) \right] \\ &= S_{\mathbf{m};4}^z (S_{\mathbf{n};1}^+ + S_{\mathbf{n};2}^+ + S_{\mathbf{n};3}^+) - S_{\mathbf{m};4}^+ (S_{\mathbf{n};1}^z + S_{\mathbf{n};2}^z + S_{\mathbf{n};3}^z) + S_{\mathbf{m};4}^z (S_{m_3+1;1}^+ \\ &\quad + S_{m_1-1,m_3+1;2}^+ + S_{m_2-1,m_3+1;3}^+) - S_{\mathbf{m};4}^+ (S_{m_3+1;1}^z + S_{m_1-1,m_3+1;2}^z + S_{m_2-1,m_3+1;3}^z). \end{aligned} \quad (\text{A.17})$$

Після Фур'є перетворення вираз (A.17) набуває вигляду:

$$\frac{1}{\mathcal{N}} \sum_{\mathbf{m}} e^{-i\mathbf{q}\cdot\mathbf{R}_{\mathbf{m}}} [S_{\mathbf{m};4}^+, \mathcal{H}] \rightarrow -2J\langle S^z \rangle (-\phi_3^* S_{\mathbf{q};1}^+ - \phi_{13} S_{\mathbf{q};2}^+ - \phi_{23} S_{\mathbf{q};3}^+ + 3S_{\mathbf{q};4}^+); \quad (\text{A.18})$$

тоді четвертий рядок матриці функцій Гріна  $\mathbb{G}$  виглядатиме так:

$$\omega G_{3;\beta}(\omega) = 2\langle S^z \rangle \delta_{3,\beta} - 2J\langle S^z \rangle [-\phi_3^* G_{1;\beta}(\omega) - \phi_{13} G_{2;\beta}(\omega) - \phi_{23} G_{3;\beta}(\omega) - \phi_{23} G_{4;\beta}(\omega)]. \quad (\text{A.19})$$

Із врахуванням (A.10), (A.13), (A.16) і (A.19) можемо записати рівняння для функцій Гріна у матричній формі

$$(\omega \mathbb{I} + 2J\langle S^z \rangle \mathbb{F}) \mathbb{G}(\omega) = 2\langle S^z \rangle \mathbb{I}, \quad (\text{A.20})$$

де матриця  $\mathbb{F}$  співпадає із (3.6).

### A.3. Обчислення внутрішньої енергії в наближенні Тяблікова

При обчисленні середньої енергії в наближенні Тяблікова нам необхідно однаково врахувати вклад від поперечних і поздовжніх спінових кореляцій

у гамільтоніані (3.1) в наближенні Тяблікова. Для цього розглянемо середнє  $\sum_{\alpha=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}] \rangle$ . Комутатори  $[S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}]$  ми розглянули в додатку A.2. Отже, матимемо

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}] \rangle = -12\mathcal{N}J \langle S^z \rangle + 2 \langle \mathcal{H} \rangle \\
& + J \sum_{\mathbf{m}} \left[ \langle S_{\mathbf{m};2}^z S_{\mathbf{m};1}^- (S_{\mathbf{m};2}^+ + S_{\mathbf{m};3}^+ + S_{\mathbf{m};4}^+ + S_{m_1-1;2}^+ + S_{m_2-1;3}^+ + S_{m_3-1;4}^+) \rangle \right. \\
& + S_{\mathbf{m};2}^z S_{\mathbf{m};2}^- (S_{\mathbf{m};1}^+ + S_{\mathbf{m};3}^+ + S_{\mathbf{m};4}^+ + S_{m_1+1;1}^+ + S_{m_1+1,m_2-1;3}^+ + S_{m_1+1,m_3-1;4}^+) \rangle \\
& + S_{\mathbf{m};3}^z S_{\mathbf{m};3}^- (S_{\mathbf{m};1}^+ + S_{\mathbf{m};2}^+ + S_{\mathbf{m};4}^+ + S_{m_2+1;1}^+ + S_{m_1-1,m_2+1;2}^+ + S_{m_2+1,m_3-1;4}^+) \rangle \\
& \left. + S_{\mathbf{m};4}^z S_{\mathbf{m};4}^- (S_{\mathbf{m};1}^+ + S_{\mathbf{m};2}^+ + S_{\mathbf{m};3}^+ + S_{m_3+1;1}^+ + S_{m_1-1,m_3+1;2}^+ + S_{m_2-1,m_3+1;3}^+) \rangle \right], \tag{A.21}
\end{aligned}$$

а Фур'є перетворення (3.11)

$$\begin{aligned}
& \sum_{\alpha=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}] \rangle = -12\mathcal{N}J \langle S^z \rangle + 2 \langle \mathcal{H} \rangle \\
& + J \sum_{\mathbf{q}} \left[ \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};1} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle (1 + e^{-iq_1}) + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};1} S_{\mathbf{q};3}^+ \rangle (1 + e^{-iq_2}) \right. \\
& + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};1} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle (1 + e^{-iq_3}) + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};2} S_{\mathbf{q};1}^+ \rangle (1 + e^{iq_1}) \\
& + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};2} S_{\mathbf{q};3}^+ \rangle (1 + e^{i(q_1-q_2)}) + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};2} S_{\mathbf{q};4}^+ \rangle (1 + e^{i(q_1-q_3)}) \\
& + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};3} S_{\mathbf{q};1}^+ \rangle (1 + e^{iq_2}) + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};3} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle (1 + e^{i(q_2-q_1)}) \\
& + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};3} S_{\mathbf{q};4}^+ \rangle (1 + e^{i(q_2-q_3)}) + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};4} S_{\mathbf{q};1}^+ \rangle (1 + e^{iq_3}) \\
& \left. + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};4} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle (1 + e^{i(q_3-q_1)}) + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};4} S_{\mathbf{q};3}^+ \rangle (1 + e^{i(q_3-q_2)}) \right] \\
& = -12\mathcal{N}J \langle S^z \rangle + 2 \langle \mathcal{H} \rangle \\
& + 2J \sum_{\mathbf{q}} \left[ \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};1} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle \phi_1 + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};1} S_{\mathbf{q};3}^+ \rangle \phi_2 + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};1} S_{\mathbf{q};4}^+ \rangle \phi_3 \right. \\
& + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};2} S_{\mathbf{q};1}^+ \rangle \phi_1^* + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};2} S_{\mathbf{q};3}^+ \rangle \phi_{12}^* + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};2} S_{\mathbf{q};4}^+ \rangle \phi_{13}^* \\
& + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};3} S_{\mathbf{q};1}^+ \rangle \phi_2^* + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};3} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle \phi_{12} + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};3} S_{\mathbf{q};4}^+ \rangle \phi_{23}^* \\
& \left. + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};4} S_{\mathbf{q};1}^+ \rangle \phi_3^* + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};4} S_{\mathbf{q};2}^+ \rangle \phi_{13} + \langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};4} S_{\mathbf{q};3}^+ \rangle \phi_{23} \right]. \tag{A.22}
\end{aligned}$$

Для лівої частини рівняння (A.22) можемо записати

$$\begin{aligned} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}] \rangle &= i \left[ \frac{d}{dt} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- S_{\mathbf{q};\alpha}^+(t) \rangle \right] \\ &= i \left[ \frac{d}{dt} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega e^{-i\omega t} J_{\alpha\alpha}(\omega) \right] = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \omega e^{-i\omega t} J_{\alpha\alpha}(\omega), \end{aligned} \quad (\text{A.23})$$

де

$$J_{\alpha\alpha} = i \frac{G_{\alpha\alpha}(\omega + i0) - G_{\alpha\alpha}(\omega - i0)}{e^{\omega/T} - 1} = 2\pi \sum_{\gamma=1}^4 \frac{2\langle S^z \rangle \langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \alpha \rangle}{e^{\omega/T} - 1} \delta(\omega + 2J\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}). \quad (\text{A.24})$$

Тобто, отримаємо вираз

$$\sum_{\alpha=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^- [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, \mathcal{H}] \rangle = 4|J|\langle S^z \rangle^2 \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{e^{\frac{2|J|\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1}. \quad (\text{A.25})$$

В правій частині рівняння (A.22) кореляційна функція  $\langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};\beta} S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle$  може бути знайдена із функції Гріна  $H_{\alpha\beta}(t) \equiv \langle \langle S_{\mathbf{q};\alpha}^+ | (S^z S^-)_{\mathbf{q};\beta} \rangle \rangle = -i\Theta(t) \langle [S_{\mathbf{q};\alpha}^+, (S^z S^-)_{\mathbf{q};\beta}] \rangle$ ,  $H_{\alpha\beta}(\omega) = \int_{-\infty}^{+\infty} e^{i\omega t} H_{\alpha\beta}(t) dt$ . Використавши спектральну теорему

$$\langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};\beta} S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{H_{\alpha\beta}(\omega + i0) - G_{\alpha\beta}(\omega - i0)}{e^{\omega/T} - 1}, \quad (\text{A.26})$$

і записавши рівняння руху в наближенні Тяблікова для функцій Гріна  $\mathbb{H}(\omega)$ , прийдемо до виразу

$$\sum_{\gamma=1}^4 (\omega \delta_{\alpha\beta} + 2J\langle S^z \rangle F_{\alpha\gamma}) H_{\gamma\beta}(\omega) = -\langle S^z \rangle \delta_{\alpha\beta}. \quad (\text{A.27})$$

Отже функції Гріна

$$H_{\alpha\beta}(\omega) = -\langle S^z \rangle \sum_{\gamma=1}^4 \frac{\langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \alpha \rangle}{\omega + 2J\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}, \quad (\text{A.28})$$

а корелятор

$$\langle (S^z S^-)_{\mathbf{q};\beta} S_{\mathbf{q};\alpha}^+ \rangle = -\langle S^z \rangle \sum_{\gamma=1}^4 \frac{\langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \alpha \rangle}{e^{\frac{2|J|\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1}. \quad (\text{A.29})$$

Тому приходимо до рівняння, з якого можемо знайти середню енергію  $\langle \mathcal{H} \rangle$  в наближенні Тяблікова:

$$\begin{aligned}
4|J|\langle S^z \rangle^2 \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\mathbf{q}} \frac{\omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{e^{-\frac{2J\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1} &= 3NJ\langle S^z \rangle + 2\langle \mathcal{H} \rangle \\
+ 2|J|\langle S^z \rangle \sum_{\gamma=1}^4 \sum_{\substack{\alpha,\beta=1 \\ (\alpha \neq \beta)}}^4 \sum_{\mathbf{q}} \varphi_{\alpha\beta} \frac{\langle \alpha | \gamma \mathbf{q} \rangle \langle \gamma \mathbf{q} | \beta \rangle}{e^{-\frac{2J\langle S^z \rangle \omega_{\gamma;\mathbf{q}}}{T}} - 1}, & \\
\varphi_{12} = \varphi_{21}^* = \phi_1, \quad \varphi_{13} = \varphi_{31}^* = \phi_2, \quad \varphi_{14} = \varphi_{41}^* = \phi_3, & \\
\varphi_{23} = \varphi_{32}^* = \phi_{12}, \quad \varphi_{24} = \varphi_{42}^* = \phi_{13}, \quad \varphi_{34} = \varphi_{43}^* = \phi_{23}, & \tag{A.30}
\end{aligned}$$

див. рівняння (3.23) у основному тексті.

## ДОДАТОК Б

# ДЕЯКІ ДОПОМІЖНІ РЕЗУЛЬТАТИ У МЕТОДІ ЕНТРОПІЇ НА ГРАТЦІ ПІРОХЛОРУ

У цьому додатку наведемо деякі допоміжні результати в методі ентропії.

На рис. **Б.1** зображено теплоємність  $c(T)$  і магнітну сприйнятливості  $\chi(T)$  у випадку безщілинного спектру для значень  $\alpha = 1, 3$ . Цей рисунок доповнює рис. **3.11** із основного тексту.

На рис. **Б.2** наведено криві найвищих порядків Паде апроксимант для теплоємності  $c(T)$  для випадку безщілинного спектру для значень енергії  $e_0 = -0.521 \dots - 0.515$ .

На рис. **Б.3** наведено криві для теплоємності  $c(T)$ , магнітної сприйнятливості  $\chi(T)$  і ентропії  $s(T)$  для значень енергії із найбільшою кількістю близьких Паде апроксимант для випадку безщілинного спектру і спектру із щілиною.

Як бачимо з приведених рисунків, а також із рисунків в основному тексті, у методі ентропії виникає потреба працювати із великими наборами кривих теплоємності  $c(T)$  і магнітної сприйнятливості  $\chi(T)$ . Навіть якщо користуватися лише результатами високотемпературних розвинень починаючи з десятого порядку, таких кривих може бути кілька десятків (і ще більше, якщо відомі розвинення до, скажімо, двадцятого порядку, як для випадку  $S = 1/2$  антиферромагнітної моделі на гратці кагоме [162]). При цьому є потреба оцінювати «близькість» великого числа подібних кривих.

У дисертації область значень енергії основного стану  $e_0$ , де б спостерігалась така «близька» поведінка Паде апроксимант оцінювалась із поведінки щілини  $\Delta_{\text{app}}$  (для випадку термічно активованої низькотемпературної поведінки теплоєм-



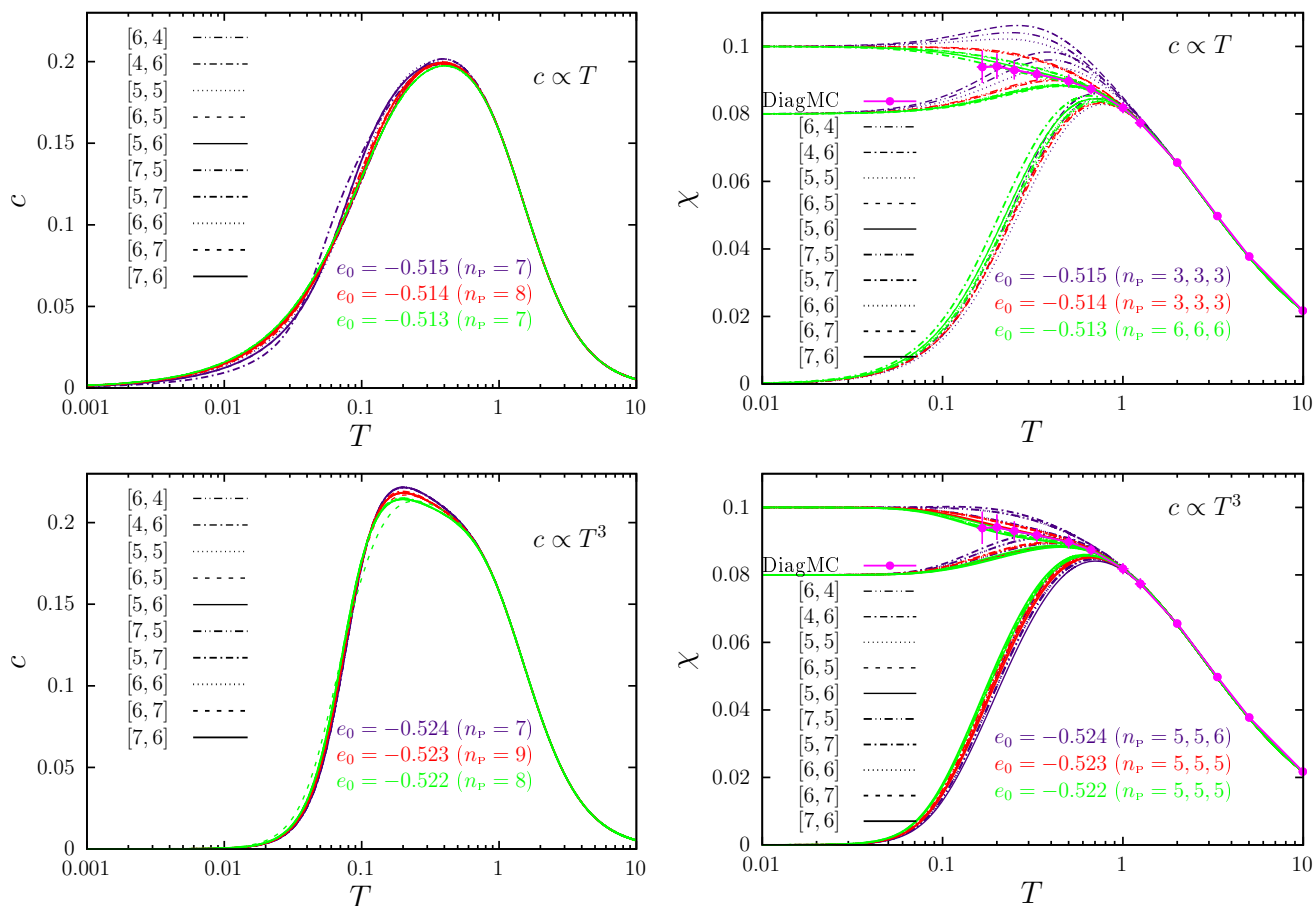


Рис. Б.1. Теплоємність  $c$  (ліва колонка) і магнітна сприйнятливість  $\chi$  (права колонка)  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору у випадку безщільного спектру  $c \propto T^\alpha$ . Зверху відповідні величини наведено для випадку  $\alpha = 1$  (для значень енергії основного стану  $e_0 = -0.515 \dots - 0.513$ ); знизу для  $\alpha = 3$  ( $e_0 = -0.524 \dots - 5.222$ ). Значення  $n_p$  відповідає кількості близьких Паде апроксимант для відповідного  $e_0$ . При обчисленні сприйнятливості використовувалися три значення  $\chi_0 = 0, 0.08, 0.1$ .

ності  $c \propto e^{-\Delta/T}$ ) і множника  $A_{\text{app}}$  (для степеневі низькотемпературної поведінки теплоємності  $c \propto T^\alpha$ ), див. рис. 3.7, рис. 3.9, а також рис. 3.10.

Більш витончений підхід запропонований у роботі [162]. Розглядаючи значення енергії основного стану як невідомий параметер, для певного набору температур при певному порядку високотемпературних розвинень обчислюються всі можливі Паде апроксиманти. Обчислюємо середнє значення набору (для всіх температур окремо) і відкидуємо криві, які відрізняються від середнього на заздалегідь зафіксоване значення  $\delta$  (скажімо,  $\delta = 0.01, 0.001$ ). Після цього повторюємо

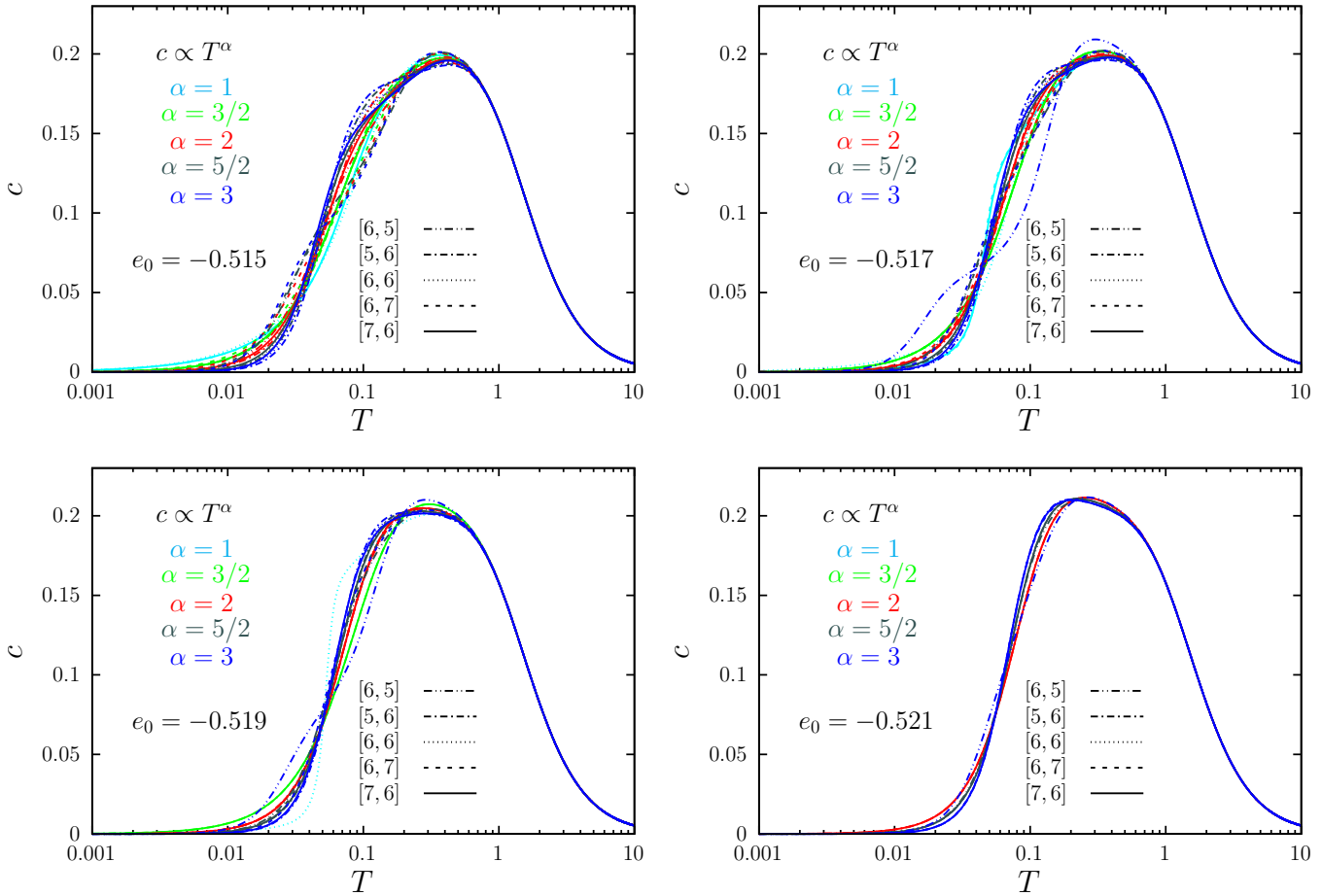


Рис. Б.2. Теплоємність  $c$  у випадку безщільного спектру при різних значеннях  $e_0 = -0.521 \dots - 0.515$  для  $\alpha = 1, 3/2, 2, 5/2, 3$ .

цю процедуру до тих пір, поки всі криві будуть відрізнятися між собою на значення  $\delta$ . З допомогою такого алгоритму можна дуже точно оцінити значення енергії основного стану. Щоправда для цього необхідно використовувати високі порядки високотемпературних розвинень.

Так у роботі [162] вивчали квантову  $S = 1/2$  антиферромагнітну модель Гайзенберга на ґратці кагоме. Розглядали високотемпературні розвинення від сімнадцятого до двадцятого порядку з початковим набором і більш ніж шістьдесят Паде апроксимант. Застосувавши описану вище процедуру, за різних припущень про низькотемпературну поведінку теплоємності, для кожного із сценаріїв близько тридцяти Паде апроксимант були дуже близькими ( $\delta = 0.001$ ). Отримані значення енергії основного стану  $e_0 \approx -0.4372(15)$  (в припущенні про спектр із щільною) і  $e_0 \approx -0.4386(15), -0.4414(25)$  (в припущенні про безщільний спектр із пока-

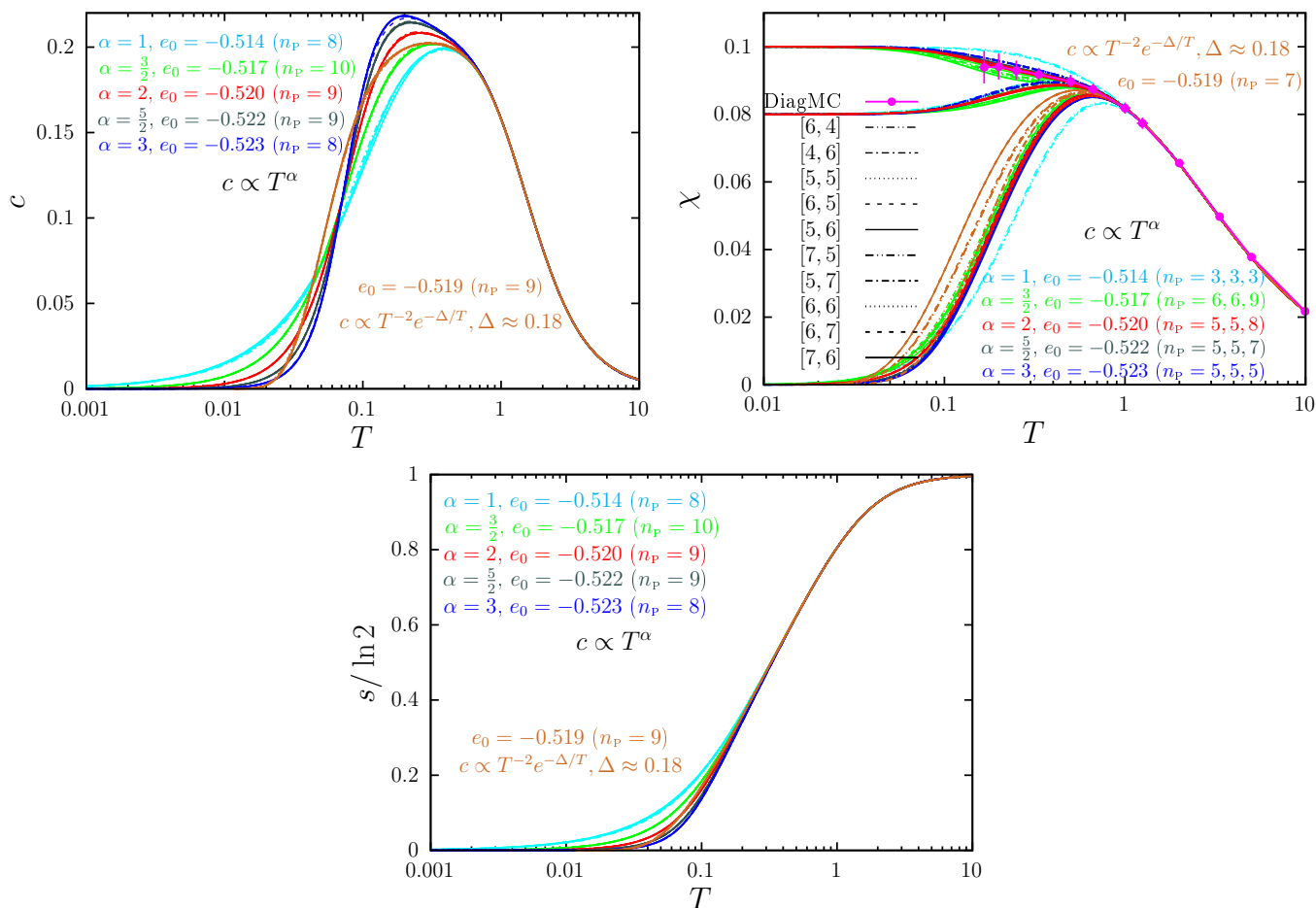


Рис. Б.3. Порівняння результатів методу ентропії для значень енергії із найбільшою кількістю близьких Паде апроксимант у випадку безщільного спектру і спектру із щілиною.

зниками  $\alpha = 1$  і  $\alpha = 2$  відповідно) є дуже близькими до результатів, отриманих методом симуляцій DMRG  $e_0 = -0.4386(5)$ . Бачимо, що при достатньо високих порядках високотемпературних розвинень, метод ентропії дає змогу отримати дуже добру оцінку енергії основного стану.

## ДОДАТОК В

# СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА

1. The spin-1/2 Heisenberg ferromagnet on the pyrochlore lattice: A Green's function study / T. Hutak, P. Müller, J. Richter, T. Krokhumalskii, O. Derzhko // *Condensed Matter Physics*. 2018. Vol. 21, no. 3(33705). P. 1–13.
2. Adapting Planck's route to investigate the thermodynamics of the spin-half pyrochlore Heisenberg antiferromagnet / O. Derzhko, T. Hutak, T. Krokhumalskii, J. Schnack, J. Richter // *Phys. Rev. B*. 2020. Vol. 101. P. 174426.
3. Low-temperature thermodynamics of the two-leg ladder Ising model with trimer rungs: A mystery explained / T. Hutak, T. Krokhumalskii, O. Rojas, S. M. de Souza, O. Derzhko // *Physics Letters A*. 2021. Vol. 387. P. 127020.
4. Towards low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains / T. Krokhumalskii, T. Hutak, O. Rojas, S. M. de Souza, O. Derzhko // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2021. Vol. 573. P. 125986.
5. *Гутак Т.* Термодинаміка квантового  $S = 1/2$  феромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору // XVIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 7–8 червня, 2018. Тези доповідей. Львів, 2018. С. 42.
6. *Гутак Т.* Термодинаміка спінових систем: від високих до низьких температур // XIX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 13–14 червня,

2019. Тези доповідей. Львів, 2019. С. 31.
7. *T. Hutak, T. Krokhmalskii, O. Derzhko, and J. Richter*, Thermodynamics of the  $S = 1$  Heisenberg antiferromagnet on kagome lattice // Statistical Physics: Modern Trends and Applications 3–6 July 2019, Lviv, Ukraine. Book of abstracts. Lviv, 2019. P. 114.
  8. *T. Krokhmalskii, T. Hutak, O. Rojas, S. M. de Souza, and O. Derzhko*, Low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains // Statistical Physics: Modern Trends and Applications 3–6 July 2019, Lviv, Ukraine. Book of abstracts. Lviv, 2019. P. 115.
  9. *Гутак Т.* Термодинаміка квантового  $S = 1/2$  антиферромагнетика Гайзенберга на ґратці пірохлору // XX Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 15–16 жовтня, 2020. Тези доповідей. Львів, 2020. С. 30.
  10. *Гутак Т.* Термодинамічні і динамічні властивості  $S = 1/2$  моделі Гайзенберга на пилкоподібному ланцюжку // XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини Львів, 11–13 жовтня, 2021. Тези доповідей. Львів, 2021. С. 19.

## ДОДАТОК Г

# АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

Результати досліджень були представлені на конференціях:

- Korrelationstage 2021 (Дрезден, 2021);
- 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Львів, 2019);
- XXI, XIX, XX і XXI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених (Львів, 2018 – 2021 рр.)