

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

КРУПНІЦЬКА Олеся Михайлівна

УДК 537.9, 537.622

**ФРУСТРОВАНІ КВАНТОВІ
АНТИФЕРОМАГНЕТИКИ ГАЙЗЕНБЕРГА.
ПОБЛИЗУ ПАРАДИГМИ ЛОКАЛІЗОВАНИХ
МАГНОНІВ**

01.04.02 – теоретична фізика

Дисертація
на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Науковий керівник:
доктор фізико-математичних наук
Держко Олег Володимирович

Львів - 2017

ЗМІСТ

Вступ	5
Розділ 1. Огляд літератури	12
1.1. Концепція локалізованих магнонів в теорії квантових фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга	12
1.2. Твердотільні реалізації квантових фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга з локалізованими магнонами	17
Розділ 2. Напівкількісна теорія низькотемпературних властивостей деформованого фрустрованого ромбічного ланцюжка Гайзенберга у сильних магнітних полях	22
2.1. Локалізовані магнони у ідеальному фрустрованому ромбічному ланцюжку	22
2.2. Майже локалізовані магнони у деформованому фрустрованому ромбічному ланцюжку	25
2.3. Криві намагніченості для азуриту	30
2.4. Висновки	32
Розділ 3. Квантовий антиферромагнетик Гайзенберга з майже бездисперсійною одномагнонною зоною	35
3.1. Побудова ефективних гамільтоніанів. Наближення сильного зв'язку	37
3.2. Підхід локалізованих магнонів	43
3.3. Результати точної діагоналізації для вихідної та ефективної моделей	51
3.4. Застосування до азуриту	57
3.5. Гратка квадратне кагоме. Випадок загальнішої геометрії	59
3.6. Фазовий перехід Березінського-Костерліца-Таулеса	64

3.7. Висновки	67
Розділ 4. Анізотропія обмінних взаємодій Гайзенберга та довільно орієнтоване зовнішнє магнітне поле	69
4.1. Ефективний опис фрустрованого ромбічного XXZ ланцюжка Гайзенберга у довільно орієнтованому зовнішньому магнітному полі. Випадок $\mathbf{h} = (0, 0, h)$	69
4.2. Випадок $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$	72
4.3. Порівняння вихідних та ефективних моделей	74
4.4. Застосування до азуриту	78
4.5. Висновки	80
Розділ 5. Ефективний опис фрустрованого ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга	82
5.1. Ефективний гамільтоніан поблизу поля насичення	84
5.2. Ефективний гамільтоніан, якщо поле мале	89
5.3. Висновки	90
Розділ 6. Локалізовані магнони в ромбічному ланцюжку та міжланцюжкові взаємодії	91
6.1. Система ромбічних спінових ланцюжків. Ефективна модель.	92
6.2. Результати точної діагоналізації	94
6.3. Висновки	96
ВИСНОВКИ	97
Список використаних джерел	99
ДОДАТКИ	117
Д.1. Теорія збурень	117
Д.2. Ефективні гамільтоніани для фрустрованого димер-плакетного спінового ланцюжка	119

Д.2.1. Наближення сильного зв'язку	119
Д.2.2. Підхід локалізованих магнонів	121
Д.3. Ефективні гамільтоніани для ґратки квадратне кагоме	123
Д.3.1. Наближення сильного зв'язку	123
Д.3.2. Підхід локалізованих магнонів	126
Д.4. Узагальнений фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок . . .	129
Д.5. Система зв'язаних димерів, що утворюють подвійний шар . . .	130
Д.5.1. Випадок $\mathbf{h} = (0, 0, h)$	132
Д.5.2. Випадок $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$	133
Д.5.3. Застосування до магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$	135
Д.6. Виведення ефективних гамільтоніанів для ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга	138

ВСТУП

Актуальність теми. В останні роки багато уваги приділяється вивченню властивостей фрустрованих квантових спінових антиферромагнетиків. Ці системи стали об'єктом інтенсивних теоретичних та експериментальних досліджень [1–3]. Великий інтерес до таких систем зумовлений тим, що на відміну від ферромагнетиків, в антиферромагнітних спінових системах можлива конкуренція взаємодій — фрустрації. Це може бути конкуренція обмінних взаємодій між сусідніми спінами і наступними після сусідніх спінами на простих ґратках (наприклад, $J_1 - J_2$ модель на квадратній ґратці) чи взаємодія найближчих спінів на ґратках зі складною геометрією (наприклад, на ґратці кагоме). Фрустрації і квантові флуктуації можуть приводити до цілковитого зникнення далекого магнітного порядку і появи різних станів (фаз) з екзотичними властивостями. Крім того, взаємодія з сильним магнітним полем також відіграє роль однієї з конкуруючих взаємодій, що впливає на квантові фазові переходи між різними типами станів.

Серед фрустрованих квантових антиферромагнетиків існує спеціальний клас моделей, які в певному режимі (сильні магнітні поля та низькі температури) допускають існування спеціальних станів, які називають локалізованими магнонами. Теоретично локалізовані магнони були відкриті в 2002 році в роботі [4], звідки й почалось їх інтенсивне дослідження [5–11]. Теорія, розвинена в [4], а потім в [9–11] стосується так званої ідеальної плоскостонної геометрії, коли одномагنونні стани строго локалізовані (одномагنونна зона строго бездисперсійна). Однак, в реальних системах можливе відхилення від умов, які забезпечують строгую локалізацію магنونів. Прикладами таких систем є природний мінерал азурит $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ [12, 13], ліказит $\text{Cu}_3(\text{OH})_5(\text{NO}_3) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ [14] чи магнітна

сполука $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [15]. Постає важливе питання: які є наслідки для спостережуваних властивостей через відхилення від ідеальної геометрії? Іншими словами, як виглядатиме теорія таких фрустрованих квантових антиферромагнетиків поблизу парадигми локалізованих магнонів? Питання застосовності теорії локалізованих магнонів до пояснення результатів експериментальних досліджень визначає актуальність теми даної дисертаційної роботи.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт за темою “Квантові багаточастинкові ґраткові системи: динамічний відгук і ефекти сильних кореляцій” (2013-2017 рр., номер держреєстрації 0112U007761) та в межах програмно-цільової теми “Багатомасштабність і структурна складність конденсованої речовини: теорія і застосування” (2012-2016 рр., номер держреєстрації 0112U003119).

Мета і задача дослідження. Метою дослідження є розроблення систематичної теорії для низькотемпературних властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга з майже бездисперсійною магнонною зоною в режимі сильних магнітних полів та низьких температур. У роботі були поставлені наступні задачі:

- розроблення ефективної теорії спінів- $\frac{1}{2}$ фрустрованої антиферромагнітної моделі Гайзенберга на трьох ґратках з майже бездисперсійною магнонною зоною (фрустровані ромбічний та димер-плакетний спінові ланцюжки та двовимірні ґратки квадратне кагоме);
- вивчення низькотемпературних властивостей спінів- $\frac{1}{2}$ XXZ антиферромагнітної моделі Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку в довільно орієнтованому магнітному полі; побудова ефективного опису низькотемпературних властивостей вихідної моделі у полях поблизу поля насичення;

- отримання низькоенергетичних ефективних гамільтоніанів для фрустрованого класично-квантового спіну- $\frac{1}{2}$ ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга;
- дослідження ефектів міжланцюжкових взаємодій у системі фрустрованих квантових антиферомагнітних ромбічних ланцюжків.

Об’єктом дослідження є спіну- $\frac{1}{2}$ антиферомагнітна модель Гайзенберга на кількох фрустрованих ґратках (ромбічний та димер-плакетний спінові ланцюжки, ґратка квадратне кагоме) з майже бездисперсійними магнонними станами.

Предметом дослідження даної роботи є характерні особливості термодинаміки фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга в сильних магнітних полях при низьких температурах.

Методи дослідження. В роботі застосовувались як аналітичні (операторна теорія збурень, точні розв’язки методом ферміонізації Йордана-Вігнера), так і числові методи. Разом з числовим методом точної діагоналізації, який застосовується для невеликих систем, використовується метод квантового Монте Карло, який придатний для значно більших систем, але лише для ефективних моделей (у яких нема конкуренції взаємодій), а також метод ренормалізаційної групи для матриці густини (одновимірні системи).

Наукова новизна одержаних результатів. В дисертаційній роботі побудовано ефективні моделі для опису деяких фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга в сильних магнітних полях при низьких температурах. Ефективні моделі є значно простіші за вихідні. Запропоновані ефективні моделі дозволяють дати теоретичні передбачення для низькотемпературних властивостей азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ в сильних магнітних полях (понад 30 Т). На основі експериментальних даних розроблена теорія дає змогу оцінити параметр анізотропії XXZ обмінних взаємодій Гайзенберга для азуриту: $\Delta \approx 0.85$. Запропоновано реалізацію фазового переходу Березінського-Костерліца-Таулеса у

двовимірному фрустрованому антиферромагнетику при низьких температурах і сильних магнітних полях. Врахування неідеальної геометрії, анізотропії обмінних взаємодій, а також міжланцюжкових взаємодій дає змогу пов'язати теорію з експериментом.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані у даній дисертаційній роботі результати можуть мати практичне значення для подальших теоретичних та експериментальних досліджень. Наприклад, запропонований підхід застосовний до тлумачення експериментів для низки сполук, в яких реалізуються фрустровані спінові ланцюжки (азурит $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, ліказит $\text{Cu}_3(\text{OH})_5(\text{NO}_3) \cdot 2\text{H}_2\text{O}$, магнітна сполука $\text{K}_3\text{Cu}_3\text{AlO}_2(\text{SO}_4)_4$ [16]), а також до ефективного опису недавно синтезованої магнітної солуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Аналітичні та числові результати у дисертації для фрустрованих квантових спінових систем слугуватимуть для порівняння при дослідженні іншими методами у майбутньому. Окремі фрагменти дисертаційної роботи можуть бути використані у лекціях з теорії конденсованої матерії для магістрів і аспірантів.

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи доктор фізико-математичних наук О. В. Держко. Одна стаття виконана дисертанткою одноосібно [21]. В спільних публікаціях [17–20, 22] авторці дисертації належить:

- отримання одномагнетонного спектру та виразу для вільної енергії для ідеального та деформованого ромбічних ланцюжків в режимі сильних полів та низьких температур [17];
- аналітичне виведення виразів для ефективних моделей з допомогою операторної теорії збурень в наближенні сильного зв'язку та в підході локалізованих магнетонів [18];
- числовий аналіз ефективних моделей [18, 19];
- виведення ефективних гамільтоніанів для спінів- $\frac{1}{2}$ XXZ ромбічного лан-

- цюжка Гайзенберга в довільно орієнтованому магнітному полі [20];
- отримання фазової діаграми, яка ілюструє появу фази спінової рідини, для ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга [22];
- побудова ефективного опису системи ромбічних спінових ланцюжків зі слабкою міжланцюжковою взаємодією.

Обговорення та інтерпретацію отриманих результатів в статтях [17–20, 22] співавтори виконували разом.

Апробація результатів дисертації. Результати дисертації представлялись на таких конференціях: Міжнародна 4-та наукова конференція “Статистична фізика: сучасні напрямки та застосування” (Львів, 2012 р.); Національна конференція “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики” (Тернопіль, 2012 р.); XII, XIII, XIV, XV та XVI Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2012, 2013, 2014, 2015 та 2016 рр.); Міжнародна 5-та конференція молодих вчених “Проблеми теоретичної фізики” (Київ, 2013 р.); TRENDOXIDES2015, New TRENDS in Correlated OXIDES and Interfaces (Brescia, 2015); Conference: What about U ? - Effects of Hubbard Interactions and Hund’s Coupling in Solids (Trieste, 2016), а також на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Публікації. За результатами дисертації опубліковано 16 наукових праць, з них 6 статей [17–22] у фахових наукових журналах, 2 препринти Інституту фізики конденсованих систем [23, 24], 8 тез наукових конференцій [25–32].

Структура та об’єм дисертації. Дисертація складається із вступу, розділу з оглядом літератури та п’яти основних розділів, у яких викладені результати досліджень дисертанта, а також висновків, списку використаної літератури та шести додатків. Робота викладена на 98 сторінках (разом з літературою та додатками – 140 сторінок), бібліографічний список містить 149 найменувань

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.

В першому розділі проведено огляд літератури, що стосується даної роботи. Пояснено концепцію локалізованих магнонів в теорії квантових фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга. Обговорено існуючі тверdotільні реалізації квантових фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга, а також сформульовано задачі, які будуть розв'язані в даній дисертаційній роботі.

У другому розділі розглянуто антиферромагнітну модель Гайзенберга на деформованому фрустрованому ромбічному спіновому ланцюжку і використано картину локалізованих магнонів, пристосовану до деформованої геометрії, щоб описати деякі низькотемпературні властивості моделі у сильних полях. Також обговорено застосовність такого опису для азуриту. Результати цього розділу опубліковано у працях [17, 25–27].

У третьому розділі, використовуючи операторну теорію збурень, побудовано низькотемпературні ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку та в підході локалізованих магнонів для ромбічного і димер-пакетного спінових ланцюжків та для ґратки квадратне кагоме. Для перевірки області застосовності отриманих ефективних моделей застосовано метод точної діагоналізації як для ефективних, так і для вихідних моделей і приведено їх порівняння. Результати цього розділу опубліковано у працях [18, 19, 28, 29].

В четвертому розділі досліджено вплив анізотропії обмінних взаємодій Гайзенберга на процеси намагнічування фрустрованого ромбічного ланцюжка у довільно орієнтованому зовнішньому магнітному полі. Збудовано ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку. Отримані ефективні моделі застосовані до пояснення експериментальних даних для природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. Подібне дослідження для системи зв'язаних димерів,

що утворюють подвійний шар і застосовне для недавно синтезованої магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ приведено в додатку 5. Результати цього розділу опубліковано у працях [20, 21, 23, 30, 31]

В п'ятому розділі для квантового узагальнення спінів- $\frac{1}{2}$ ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга до Ізингової взаємодії додано малу XU частину і побудовано ефективний гамільтоніан для опису низькотемпературних властивостей як в околі критичного поля, при якому в ланцюжку Ізинга-Гайзенберга відбувається перехід з ферімагнітного в насичений парамагнітний стан, так і при нульовому полі (деталі цього обчислення приведені в додатку 6). Використовуючи точну діагоналізацію, а також метод ренормалізаційної групи для матриці густини, побудовані криві намагніченості та теплоємності для вихідної та ефективної моделей, що дозволяє оцінити точність ефективної теорії. Побудовано фазову діаграму яка ілюструє появу фази спінової рідини у квантовому ланцюжку. Результати цього розділу опубліковано у праці [22].

В шостому розділі розглянуто систему слабо взаємодіючих ромбічних спінових ланцюжків в сильному магнітному полі при низькій температурі. Побудовано ефективний опис такої системи в наближенні сильного зв'язку. Досліджено, як видозміняться ефекти теорії локалізованих магнонів за наявності слабких міжланцюжкових взаємодій в системі. Результати цього розділу опубліковано у працях [24, 32]

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

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

1.1. Концепція локалізованих магнонів в теорії квантових фрустрованих антиферомагнетиків Гайзенберга

Починаючи з 90-х років минулого століття, фрустровані спінові системи стали об'єктом інтенсивних теоретичних, числових та експериментальних досліджень в області фізики конденсованих систем. Такий інтерес пов'язаний з відкриттям високотемпературних надпровідників з оксидів міді [33]. Нелеговані надпровідні матеріали є звичайними квантовими антиферомагнетиками типу Гайзенберга з фрустраціями, тому їх інтенсивно досліджували і в нормальному (не надпровідному) стані.

Теоретичний опис фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга зазвичай стикається з певними труднощами; наприклад, метод квантового Монте Карло є незастосовний для дослідження фрустрованих квантових систем через так звану проблему знаку (поява від'ємних або навіть комплексних імовірностей, а це приводить до того, що при обчисленні середнього для операторів доводиться сумувати знакозмінні ряди) [34]. Однак, у деяких випадках саме завдяки геометричній фрустрації в таких системах відкриваються нові можливості для їх ретельного вивчення.

Існує широкий клас одно-, дво- і тривимірних фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга з майже бездисперсійними (майже плоскими) магнонними станами з найменшою енергією. Часто бездисперсійна зона має найменшу енергію. Такі системи зазвичай називають системами з локалізованими магнонами [4, 5]. Інтерес до вивчення властивостей цих плоскостонних си-

стем зумовлений можливістю реалізації нових фаз в них, які мають класичні візуалізації [4–8, 10, 11, 37, 46–52].

Дослідження властивостей таких спінових систем у сильних магнітних полях та при низьких температурах ґрунтується на концепції локалізованих магнонів, яка дозволяє звести задачу до певного класичного граткового газу жорстких об'єктів [4–11, 35–45]. Зокрема, в працях [4, 5] показано, що геометрично фрустровані гратки володіють простими власними станами – локалізованими магнонами. Характерними особливостями спінових систем при $T = 0$, що допускають існування локалізованих магнонів, є плато і стрибки кривої намагніченості [4, 5, 7], структурна нестійкість Пайєрлса [8, 36, 37], а також залишкова ентропія в околі поля насичення [9–11].

Ідея застосувати концепцію локалізованих магнонів до вивчення низькотемпературних властивостей запропонована у статтях [9, 10, 41] на прикладі пилкоподібного спінового ланцюжка (або Δ -ланцюжка) та гратки кагOME поблизу поля насичення. Було показано, що змапувавши локалізовані магнонні ступені вільності пилкоподібного ланцюжка (гратки кагOME) на класичний гратковий газ на одновимірній гратці (газ жорстких гексагонів на трикутній гратці), можна отримати термодинамічні властивості моделей у сильних полях при низьких температурах.

Розглянемо для прикладу стандартну $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітну модель Гайзенберга в зовнішньому магнітному полі з гамільтоніаном:

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \quad S^z = \sum_{i=1}^N s_i^z, \quad J_{ij} > 0. \quad (1.1)$$

Важливо зазначити, що $[S^z, H] = 0$, а це дає змогу розділити простір станів спінової системи на підпростори з відповідним значенням S^z . Характер обмінних взаємодій J_{ij} для різних фрустрованих систем (пилкоподібний ланцюжок або гратка кагOME) показаний на рис. 1.1 і рис. 1.2. Для конкретної гратки локалізований магнонний стан зосереджений в межах так званої пастки. Для

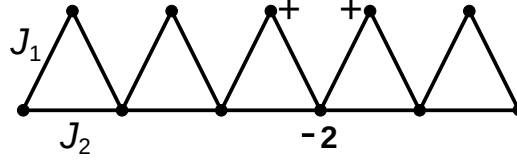


Рис. 1.1 Пилкоподібний спіновий ланцюжок. Рисунок взято з [9].

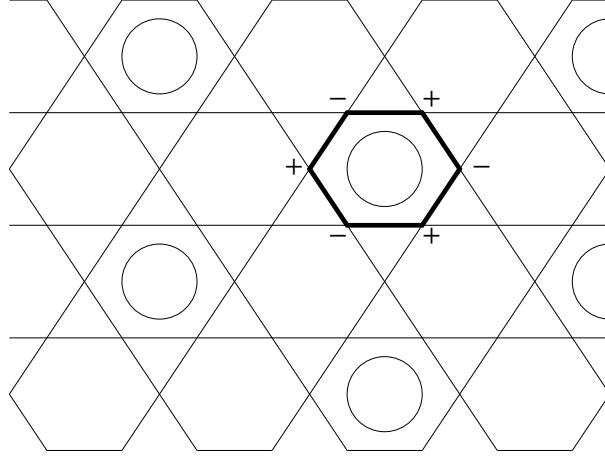


Рис. 1.2 Гратка кагOME. Цей рисунок взято з [4].

пилкоподібного спінового ланцюжка пасткою є V-подібні фрагменти гратки, а для гратки кагOME – шестикутник, див. рис. 1.1 і рис. 1.2. У підпросторах $S^z = N/2 - 2, \dots, N/2 - n_{\max}$, $n_{\max} \propto N$ можемо побудувати багатоманонні стани, заповнюючи пастки локалізованими магнонами. Кратність виродження локалізованих магнонних станів обчислюється шляхом відображення цих станів на конфігурації жорстких об'єктів на допоміжній гратці. Важливо зауважити, що локалізація магнонів можлива завдяки специфічній геометрії гратки і, отже, вимагає певних співвідношень між зв'язками J_{ij} .

Основний стан пилкоподібного ланцюжка вище поля насичення є феромагнітний стан $|0\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow \dots\rangle$, коли всі спіни направлені за полем, а найнижчий збуджений одномагнонний стан є такий – $\sum_i \alpha_i(k) s_i^- |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ з енергією ε_k . Елементарна комірка для пилкоподібного ланцюжка містить два вузли, тому одномагнонний спектр має вигляд (див. наприклад, [41]):

$$\varepsilon_{1,2}(k) = h - 2J_1s - J_2s(1 - \cos k) \pm s\sqrt{J_2^2(1 - \cos k)^2 + 2J_1^2(1 + \cos k)}.$$

Однак, для певного співвідношення констант обмінної взаємодії $J_2 = J_1/2$ ($J_1 \equiv J$) нижча зона стає бездисперсійною (плоскою): $\varepsilon_1(k) = h - 4Js$, $\varepsilon_2(k) = h - Js(1 - \cos k)$ і ця бездисперсійна зона відповідає локалізованому магнону, див. рис. 1.3.

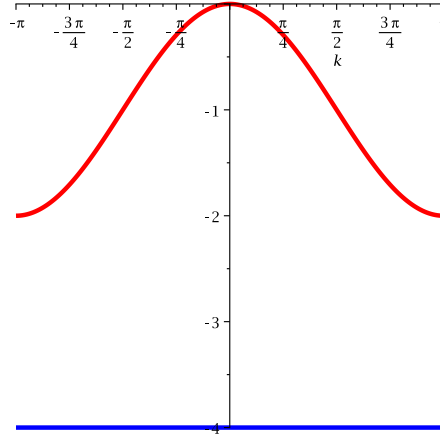


Рис. 1.3 Енергетичний спектр пилкоподібного спінового ланцюжка $\varepsilon(k)$ при $J_2 = J_1/2 > 0$ у підпросторі з $s^z = N/2 - 1$.

Інший приклад системи, що дозволяє існування локалізованих магنونів – ґратка кагоме, див. рис. 1.2. Елементарна комірка ґратки кагоме містить три вузли і тому для одномагنونного спектру маємо (див. наприклад, [41]):

$$\varepsilon_1(\mathbf{k}) = h - 6Js, \quad \varepsilon_{2,3}(\mathbf{k}) = h - 3Js \pm Js\sqrt{3(1 + 2\gamma_{\mathbf{k}})},$$

де $\gamma_{\mathbf{k}} = 1/6 \sum_l e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{a}_l}$, а сума береться по всіх шести найближчих сусідніх вузлах на трикутній ґратці Браве. Найнижча енергетична зона $\varepsilon_1(\mathbf{k})$ є бездисперсійна, див. рис. 1.4.

При низьких температурах і для магнітних полів h в околі поля насичення h_{sat} внесок у статистичну суму локалізованих станів є домінуючим [4, 7–10] і

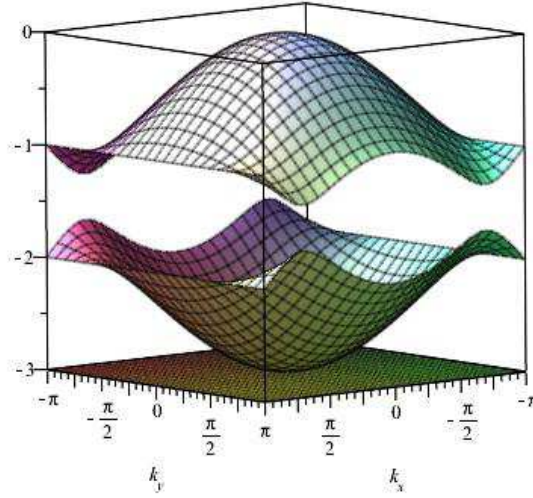


Рис. 1.4 Енергетичний спектр антиферромагнітної ґратки кагоме у підпросторі з $s^z = N/2 - 1$.

статистична сума записується таким чином:

$$\begin{aligned} Z(T, h, N) &= \sum_{n=0}^{n_{max}} g_{\mathcal{N}}(n) \exp\left(-\frac{E_n(h)}{T}\right) = \\ &= \exp\left(-\frac{E_{FM} - hNs}{T}\right) \sum_{n=0}^{n_{max}} g_{\mathcal{N}}(n) \exp\left(\frac{\mu}{T}n\right), \end{aligned} \quad (1.2)$$

де $E_n(h)$ – енергія багатоманонного стану за наявності зовнішнього магнітного поля, $\mu = \varepsilon_1 - h = h_1 - h$, а $h_1 = \varepsilon_1$ магнітне поле насичення h_{sat} .

Але ця теорія [4, 7–10] стосується так званої ідеальної геометрії, коли одноманонні стани строго локалізовані (одноманонна зона строго бездисперсійна). Ця теорія також передбачає ізотропію обмінних взаємодій Гайзенберга (параметр анізотропії $\Delta = 1$), коли напрямок прикладеного магнітного поля не є істотним. В реальних об'єктах можна очікувати, що має місце відхилення від умов, які забезпечують строгу локалізацію магнонів. Постає важливе питання: які є наслідки для спостережуваних властивостей через відхилення від ідеальної геометрії?

Хоча систематичні кількісні теорії майже локалізованих магнонів на поча-

ток робіт, представлених у дисертації, не були розроблені, варто згадати роботу [53], в якій досліджувались властивості фрустрованої двонової спінової драбинки (також див. [54], де розглянуто подвійний спіновий шар) та [55, 56], де для дослідження деформованого ромбічного спінового ланцюжка збудовані ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку без відносно до концепції локалізованих магнонів. Дане наближення було вдосконалено у [18, 19].

1.2. Твердотільні реалізації квантових фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга з локалізованими магнонами

Останні десять років багато уваги до себе привертає природний мінерал азурит $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, магнітні властивості якого можуть бути описані моделлю фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга.

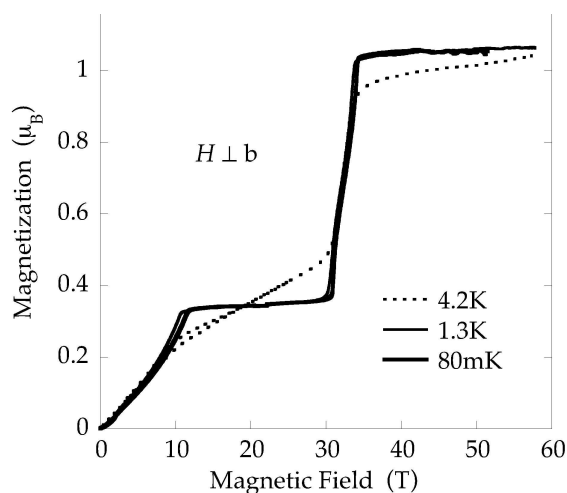


Рис. 1.5 Експериментальні результати для кривої намагніченості азуриту при низьких температурах. Рисунок взято з [13].

У 2005 році були проведені перші експериментальні дослідження магнітних властивостей азуриту [12] при температурі $T < 4.2$ K та магнітному полі $H = 0 \dots 50$ T [13]. Зокрема, була отримана крива намагніченості, яка має плато при $\frac{1}{3}$ значення намагніченості насичення і майже вертикальний стрибок до значення

насиченості в околі $H = 30$ Т, див. рис. 1.5.

Вважається, що моделлю для йонів міді в азуриті є спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітна модель Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку з параметрами J_1 , J_2 , J_3 і J_m , див. рис. 1.6. Параметри обмінних взаємодій Гайзенберга для азуриту були знайдені в роботі [58] з допомогою методу функціоналу густини і мають такі значення

$$J_1 = 15.51 \text{ K}, J_2 = 33 \text{ K}, J_3 = 6.93 \text{ K}, J_m = 4.62 \text{ K}. \quad (1.3)$$

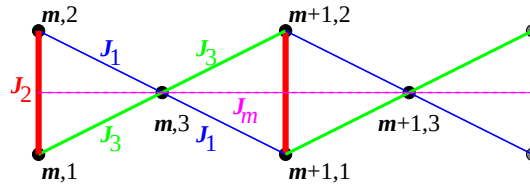


Рис. 1.6 Ромбічний спіновий ланцюжок, який використовують для пояснення магнітних властивостей азуриту.

Модель азуриту відповідає набору параметрів поблизу так званої ідеальної геометрії, яка передбачає існування локалізованих магнонів коли $J_1 = J_3 = J$ і $J_2 > 2J$. Хоча параметри обмінних взаємодій для азуриту і не відповідають умовам ідеальної геометрії, бо хоч $J_1 + J_3 = 2J < J_2$, але $|J_1 - J_3| \neq 0$, однак азурит демонструє характерні особливості, що притаманні системам, які допускають існування локалізованих магнонів. Зокрема, низькотемпературна крива намагніченості має стрибок в околі поля насичення, див. рис. 1.7.

Також у роботі [59] були отримані криві намагніченості у магнітному полі, прикладеному вздовж кристалографічної осі b та перпендикулярно до неї. Ці криві не збігаються, що може бути зумовлене анізотропією обмінних взаємодій Гайзенберга у азуриті. Крім того, вимірювання питомої теплоємності та дифракції нейтронів показали, що дальній порядок в азуриті з'являється нижче 1.85 К [60, 61], що свідчить про наявність міжланцюжкових взаємодій. Високоточний аналіз непружного розсіяння нейтронів [62] також показав, що при оцінці

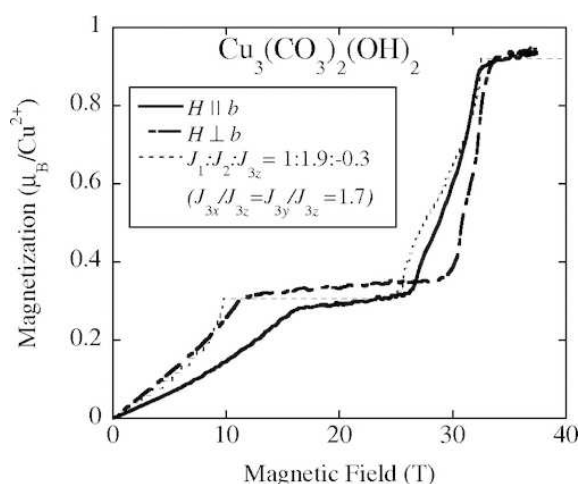


Рис. 1.7 Порівняння кривих намагніченості $M(H)$ для азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, виміряних при температурі 1.5 К у магнітному полі, прикладеному вздовж кристалографічної осі b та перпендикулярно до неї. Цей рисунок взято з [59].

спостережуваних величин азуриту необхідно брати до уваги міжланцюжкові взаємодії.

Інші властивості азуриту теж були предметом вивчення експериментаторів: досліджувались магнітопружні зв'язки в азуриті, були проведені температурні вимірювання пружних констант [63], а в працях [64, 65] приведені результати досліджень теплопровідності азуриту при низьких температурах $T = 0.3$ К та в магнітних полях до 14 Т.

Теоретичні роботи [66, 67] намагалися пояснити унікальні магнітні властивості азуриту, виходячи з моделі Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку. Ця ж модель використана і в роботі [68]: для розрахунку намагніченості азуриту використано теорію середнього поля, яка базується на нерівності Гіббса-Боголюбова. Однак ці дослідження мають попередній характер і не пояснюють всю сукупність експериментально спостережуваних властивостей цього матеріалу.

Азурит – не єдина сполука, де реалізується такий фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок Гайзенберга, що передбачає існування локалізованих ма-

гнонів. Ще одна система – магнітна сполука $K_3Cu_3AlO_2(SO_4)_4$ [16]. Ця сполука проявляє мінімальне значення міжланцюжкових взаємодій і описувати магнетизм цієї сполуки можна одновимірним ромбічним спіновим ланцюжком. Значення констант обмінних взаємодій великі, такі, що для експериментального спостереження $\frac{1}{3}$ плато в кривій намагніченості необхідне магнітне поле більше ніж 72 Т.

Звернімо увагу також і на властивості недавно синтезованої магнітної сполуки $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$, яка описується системою зв'язаних димерів, що утворюють подвійний шар. В роботі [15] представлені результати експериментальних досліджень кристалічної структури та магнітних властивостей даної сполуки. Показано, що у цій сполуці антиферромагнітні обмінні взаємодії між спін- $\frac{1}{2}$ іонами Co^{2+} описуються XXZ моделлю системи димерів, що утворюють подвійний шар [69–74]. При цьому взаємодія Ізинга становить 15% від ізотропної XY взаємодії. Крива намагнічення сполуки $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$ має плато при $\frac{1}{2}$ значення насичення намагніченості, що разом з відсутністю структурного фазового переходу в сполуці може свідчити про ідеальну фрустрацію міждимерних обмінних взаємодій.

У праці [14] приведені результати експериментальних досліджень властивостей магнітної сполуки $Cu_3(OH)_5(NO_3) \cdot 2H_2O$ (ліказит) див. рис. 1.8. Зокрема, вимірювались магнітна сприйнятливість, питома теплоємність та крива намагнічення в сильних магнітних полях (аж до 73 Т). Показано, що крива магнітної сприйнятливості має максимум при 12 К, а далекий магнітний порядок відсутній в сполуці аж до температури 2 К, що є ефектом наявності фрустрації обмінних взаємодій. Крім того, крива намагніченості має плато при $\frac{2}{3}$ значення насичення намагніченості, що зумовлено наявністю обмінної взаємодії між мономерами J_m .

Є також багато реалізацій ґратки кагоме [75–77] чи пірохлору [78–81], однак в них або спін $s > \frac{1}{2}$, що може приводити до необхідності врахувати диполь-

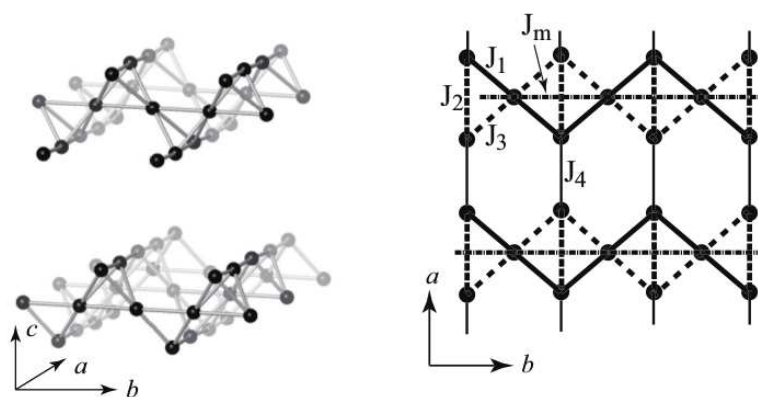


Рис. 1.8 Зліва показана кристалічна структура сполуки ліказиту. Темні кружечки позначають положення атомів Cu. Справа наведено структуру ліказиту в площині ab .

дипольні взаємодії, або обмінні взаємодії великі, що приводить до великого значення полів насичення, або геометрія сильно відхиляється від ідеальної. Все це утруднює спостереження ефектів зумовлених локалізованими магнонами.

РОЗДІЛ 2

НАПІВКІЛЬКІСНА ТЕОРІЯ НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ ДЕФОРМОВАНОГО ФРУСТРОВАНОВОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ГАЙЗЕНБЕРГА У СИЛЬНИХ МАГНІТНИХ ПОЛЯХ

2.1. Локалізовані магнони у ідеальному фрустрованому ромбічному ланцюжку

В цьому розділі розглядається спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітна модель Гайзенберга з гамільтоніаном

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \quad S^z = \sum_i s_i^z \quad (2.1)$$

на ромбічному спіновому ланцюжку, який складається з N вузлів, див. рис. 2.1.

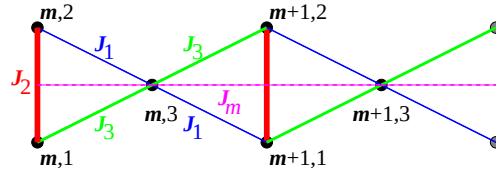


Рис. 2.1 Деформований фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок. Ідеальний ромбічний ланцюжок реалізується за умови $J_1 = J_3$, $J_m = 0$, $J_2 > 2J_1$.

У рівнянні (2.1) застосовано стандартні позначення та накладено періодичні граничні умови. Зручно позначати вузли ґратки парою індексів, де перший нумерує комірку ($m = 1, \dots, \mathcal{N} = N/3$), а другий позначає положення вузла в комірці, див. рис. 2.1. Тому спіновий гамільтоніан (2.1) для деформованого

ромбічного ланцюжка запишеться так:

$$\begin{aligned}
 H = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} & (J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} + J_3 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} \\
 & + J_1 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} + J_3 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,2} + J_m \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,3} \\
 & - h (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z)) .
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

Важливо зазначити, що $[S^z, H] = 0$, а це дає змогу розділити простір станів спінової системи на підпростори з відповідним значенням S^z . Тому маємо можливість розглядати підпростори з різними величинами $S^z = N/2, N/2 - 1, \dots$ окремо.

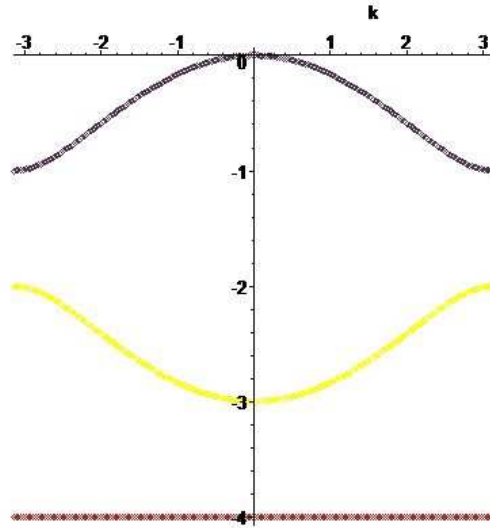


Рис. 2.2 Енергетичний спектр ідеального ромбічного спінового ланцюжка (2.4) з параметрами $J_1 = 1$, $J_2 = 3$, $J_3 = 1$.

У випадку ідеальної геометрії $J_1 = J_3$ та $J_m = 0$. Почнімо з підпростору з одним перевернутим спіном, тобто $S^z = N/2 - 1$. При знаходженні хвильової функції ідеального ромбічного ланцюжка у вигляді лінійної комбінації станів $|\uparrow\uparrow \dots \downarrow_i \dots \uparrow\rangle$, $i = 1, \dots, N$. Робимо Фур'є-перетворення, в результаті якого отримаємо три власних значення, які визначають енергетичний спектр. Одномагнетонні енергетичні зони $\varepsilon_i(\kappa)$, $i = 1, 2, 3$, $\kappa = 2\pi n/\mathcal{N}$, $n = -\mathcal{N}/2, -\mathcal{N}/2 +$

$1, \dots, \mathcal{N}/2 - 1$ знаходяться з наступного рівняння

$$\det \begin{pmatrix} -J_1 - \frac{J_2}{2} - \varepsilon_i(\kappa) & \frac{J_2}{2} & \frac{J_1}{2}(1 + e^{i\kappa}) \\ \frac{J_2}{2} & -J_1 - \frac{J_2}{2} - \varepsilon_i(\kappa) & \frac{J_1}{2}(1 + e^{i\kappa}) \\ \frac{J_1}{2}(1 + e^{-i\kappa}) & \frac{J_1}{2}(1 + e^{-i\kappa}) & -2J_1 - \varepsilon_i(\kappa) \end{pmatrix} = 0, \quad (2.3)$$

і записуються так

$$\varepsilon_1(\kappa) = -J_1 - J_2, \quad \varepsilon_{2,3}(\kappa) = -\frac{3J_1}{2} \mp \frac{J_1}{2}\sqrt{5 + 4\cos\kappa}, \quad (2.4)$$

див. рис. 2.2. Для $J_1/J_2 < 1/2$ плоска зона $\varepsilon_1(\kappa) = \varepsilon_1$ має найменшу енергію. Стани з такою енергією є синглети $|\text{lm}\rangle_m = \frac{1}{\sqrt{2}}(s_{m,1}^- - s_{m,2}^-) |\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$, $m = 1, \dots, \mathcal{N}$, що розташовані на вертикальних димерах J_2 , див. рис. 2.1.

Багатомагнетонні основні стани (тобто $S^z = \frac{N}{2} - 2, \dots, \frac{N}{2} - \frac{N}{3}$) можна збудувати, заповнюючи вертикальні зв'язки (пастки) магнетонами. Ці незалежні багатомагнетонні стани домінують в низькотемпературних властивостях спінової системи в магнітному полі h поблизу поля насичення $h_{\text{sat}} = -\varepsilon_1 = J_1 + J_2$.

Статистична сума для ромбічного спінового ланцюжка в цьому режимі (поблизу поля насичення і при низьких температурах) запишеться так [10, 11, 38, 41, 44]

$$Z(T, h, N) = e^{-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}} \sum_{n=0}^{\mathcal{N}} g_{\mathcal{N}}(n) e^{\frac{h_{\text{sat}} - h}{T}n} \quad (2.5)$$

(покладаємо $k_B = 1$) з енергією феромагнітного стану $|\uparrow\uparrow\uparrow \dots \uparrow\rangle$ $E_{\text{FM}} = (J_2/4 + J_1)\mathcal{N}$ та кратністю виродження основного стану $g_{\mathcal{N}}(n) = \mathcal{N}!/(n!(\mathcal{N}-n)!)$. Тому

$$Z(T, h, N) = e^{-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}} \left(1 + e^{\frac{h_{\text{sat}} - h}{T}}\right)^{\mathcal{N}} \quad (2.6)$$

і вільна енергія в розрахунку на одну комірку має вигляд:

$$f(T, h) = \lim_{\mathcal{N} \rightarrow \infty} \frac{-T \ln Z(T, h, N)}{\mathcal{N}} = \frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{\mathcal{N}} - T \ln \left(1 + e^{\frac{h_{\text{sat}} - h}{T}}\right). \quad (2.7)$$

Намагніченість на комірку отримується з рівняння (2.7) згідно зі стандартним співвідношенням

$$m(T, h) = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial h} = \frac{3}{2} - \frac{e^{\frac{h_{\text{sat}}-h}{T}}}{1 + e^{\frac{h_{\text{sat}}-h}{T}}}. \quad (2.8)$$

Деякі подальші обчислення низькотемпературних величин в сильних магнітних полях на основі (2.7) можна знайти у роботах [10, 11, 38, 41, 44].

2.2. Майже локалізовані магнони у деформованому фрустрованому ромбічному ланцюжку

Розглянемо відхилення від ідеальної геометрії $|J_1 - J_3|/J_2 \ll 1$, $J_m/J_2 \ll 1$. Наше завдання – побудувати ефективний опис низькотемпературної термодинаміки деформованого ромбічного спінового ланцюжка (2.2) поблизу $h_1 = (J_1 + J_3)/2 + J_2$.

Знайдемо одномагنونний спектр у випадку деформованого ромбічного ланцюжка $\varepsilon_i(\kappa)$. Повторюючи міркування, що приводять до (2.3), приходимо до наступного рівняння:

$$\det \begin{pmatrix} -J - \frac{J_2}{2} - \varepsilon_i(\kappa) & \frac{J_2}{2} & \frac{J}{2}(1 + e^{i\kappa}) - \frac{\delta}{2}(1 - e^{i\kappa}) \\ \frac{J_2}{2} & -J - \frac{J_2}{2} - \varepsilon_i(\kappa) & \frac{J}{2}(1 + e^{i\kappa}) + \frac{\delta}{2}(1 - e^{i\kappa}) \\ \frac{J}{2}(1 + e^{-i\kappa}) - \frac{\delta}{2}(1 - e^{-i\kappa}) & \frac{J}{2}(1 + e^{-i\kappa}) + \frac{\delta}{2}(1 - e^{-i\kappa}) & -2J - J_m(1 - \cos \kappa) - \varepsilon_i(\kappa) \end{pmatrix} = 0 \quad (2.9)$$

Тут введено такі позначення

$$J = \frac{J_1 + J_3}{2}, \quad \delta = \frac{J_1 - J_3}{2}. \quad (2.10)$$

З (2.9) отримаємо кубічне рівняння для $\varepsilon_i(\kappa)$:

$$\begin{aligned} & - \left(J + \frac{J_2}{2} + \varepsilon_i(\kappa) \right)^2 \left(2J + 2J_m \sin^2 \frac{\kappa}{2} + \varepsilon_i(\kappa) \right) \\ & + J_2 \left(J^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} - \delta^2 \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right) + (2J + J_2 + 2\varepsilon_i(\kappa)) \left(J^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} + \delta^2 \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right) \\ & + \frac{J_2^2}{4} \left(2J + 2J_m \sin^2 \frac{\kappa}{2} + \varepsilon_i(\kappa) \right) = 0. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Для випадку ідеальної геометрії $J = J_1$, $\delta = 0$, $J_m = 0$, рівняння (2.11) має вигляд

$$- \left(J_1 + \frac{J_2}{2} + \varepsilon_i(\kappa) \right)^2 (2J_1 + \varepsilon_i(\kappa)) + 2 (J_1 + J_2 + \varepsilon_i(\kappa)) J_1^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} + \frac{J_2^2}{4} (2J_1 + \varepsilon_i(\kappa)) = 0. \quad (2.12)$$

Очевидно, що $\varepsilon_1(\kappa) = \varepsilon_1 = -J_1 - J_2$ з (2.4) задовольняє рівняння (2.12).

Перейдемо до випадку деформованої геометрії, вважаючи δ/J_2 малим. Підставляючи

$$\varepsilon_1(\kappa) = -J - J_2 + \varepsilon_1^{(2)} \delta^2 + \dots \quad (2.13)$$

в (2.11) і збираючи доданки порядку δ^2 , знаходимо

$$\varepsilon_1^{(2)} = \frac{2J_2 \sin^2 \frac{\kappa}{2}}{J_2(J - J_2) + 2J^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} + 2J_2 J_m \sin^2 \frac{\kappa}{2}}. \quad (2.14)$$

Таким чином, з точністю до членів порядку δ^2 ми маємо

$$\begin{aligned} \varepsilon_1(\kappa) &= -J - J_2 + \\ &+ \frac{1}{1 - \frac{J}{J_2} - (1 + \cos \kappa) \frac{J^2}{J_2^2} - (1 - \cos \kappa) \frac{J_m}{J_2}} \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} (-1 + \cos \kappa) + \dots \\ &= -h_1 + \frac{1}{1 - \frac{J}{J_2} - \frac{J_m}{J_2} - \frac{J^2}{J_2^2} + \left(\frac{J_m}{J_2} - \frac{J^2}{J_2^2} \right) \cos \kappa} \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} (-1 + \cos \kappa) + \dots \end{aligned} \quad (2.15)$$

Очевидно, що плоска зона ε_1 стає дисперсійною, якщо $\delta \neq 0$. Крім того, вважаючи також J/J_2 , J_m/J_2 малими, можемо переписати рівняння (2.15) так

$$\varepsilon_1(\kappa) \approx -h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} + \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} \cos \kappa. \quad (2.16)$$

На рис. 2.3 порівнюються $\varepsilon_1(\kappa)$, отримані з рівнянь (2.11), (2.15) та (2.16) для двох наборів параметрів $J_1 = 0.85$, $J_2 = 3$, $J_3 = 1.15$, $J_m = 0$ та $J_m = 0.2$.

Повернемося до рівняння (2.6), в якому береться до уваги внесок багатоманонних станів до термодинаміки для ідеальної геометрії, коли одномагнетонна

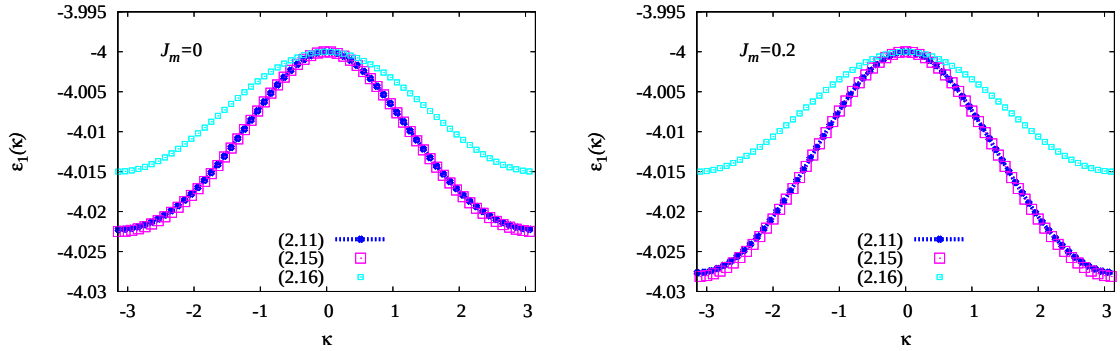


Рис. 2.3 $\varepsilon_1(\kappa)$ отримане з рівняння (2.11) (лінія), рівняння (2.15) (великі квадрати), і рівняння (2.16) (малі квадрати) для набору параметрів $J_1 = 0.85$, $J_2 = 3$, $J_3 = 1.15$, $J_m = 0$ (ліва панель), та $J_m = 0.2$ (права панель).

зона з найнижчою енергією є повністю плоска. Очевидно, що рівняння (2.6) можна записати і так:

$$Z(T, h, N) = e^{-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}} \prod_{\kappa} \left(1 + e^{\frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{T}} \right), \quad (2.17)$$

де $-\varepsilon_1(\kappa) = -\varepsilon_1 = h_{\text{sat}}$.

Далі, основне наближення для випадку деформованої геометрії є таке: вважається, що статистична сума для трохи "дисперсного" ромбічного спінового ланцюжка має такий самий вигляд як подано в рівнянні (2.17), однак з одномагнетонними енергіями з рівняння (2.15). Отже, ми отримаємо

$$Z(T, h, N) = e^{-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}} \prod_{\kappa} \left(1 + e^{\frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{T}} \right), \quad (2.18)$$

де $\varepsilon_1(\kappa)$ подано у (2.15). В результаті вільна енергія на комірку записується так:

$$\begin{aligned} f(T, h) &= \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{-T \ln Z(T, h, N)}{\mathcal{N}} = \\ &= \frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{\mathcal{N}} - \frac{T}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \ln \left(1 + e^{\frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{T}} \right), \end{aligned} \quad (2.19)$$

де $\varepsilon_1(\kappa)$ береться з рівняння (2.15).

Варто зауважити, що другий доданок в рівнянні (2.19) з $\varepsilon_1(\kappa)$, що записане в рівнянні (2.16) відповідає вільній енергії на вузол спін- $\frac{1}{2}$ XX ланцюжка в

поперечному магнітному полі [105] з гамільтоніаном

$$\mathbf{H} = -\mathbf{h} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \tau_m^z + \mathbf{J} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} (\tau_m^x \tau_{m+1}^x + \tau_m^y \tau_{m+1}^y) \quad (2.20)$$

де

$$\mathbf{h} = -h + h_1 + \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2}, \quad \mathbf{J} = \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2}. \quad (2.21)$$

Цей результат можна порівняти з ефективним гамільтоніаном для деформованого ромбічного спінового ланцюжка, отриманим у роботі [56] в межах другого порядку теорії збурень. Цей ефективний гамільтоніан також відповідає спін- $\frac{1}{2}$ XX ланцюжку в поперечному полі (2.20) з параметрами $\mathbf{h} = h - h_1 - (J_1 - J_3)^2/(4J_2)$, $\mathbf{J} = (J_1 - J_3)^2/(4J_2)$, див. рівняння (7) і (8) роботи [56]. Таким чином, результат роботи [56] міститься у рівнянні (2.19).

Зрозуміло, що тепер легко отримати намагніченість. Використовуючи (2.19), отримаємо

$$m(T, h) = \frac{3}{2} - \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \frac{e^{\frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{T}}}{1 + e^{\frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{T}}} = 1 - \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \tanh \frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{2T}. \quad (2.22)$$

Тут $\varepsilon_1(\kappa)$ є записано у рівнянні (2.15). Якщо для $\varepsilon_1(\kappa)$ застосувати простішу формулу (2.16), то другий доданок в правій стороні рівняння (2.22) відповідає намагніченості спін- $\frac{1}{2}$ XX ланцюжка в поперечному полі.

На рис. 2.4 приведено порівняння даних точної діагоналізації з передбаченнями (наближеної) аналітичної теорії. Дані точної діагоналізації стосуються скінченних систем, що складаються з $N = 18$ вузлів. Криві намагніченості для скінченних систем містять сходинки, які розмиваються зі збільшення температури. Хоча аналітичні результати стосуються термодинамічно великих систем з $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, можна відтворити намагніченість для скінченного числа комірок $\mathcal{N}$, замінивши інтеграл на суму, тобто $\int_{-\pi}^{\pi} d\kappa(\dots)/(2\pi) \rightarrow \sum_{\kappa}(\dots)/\mathcal{N}$. Порівнюючи дані точної діагоналізації і аналітичні результати, можна стверджувати наступне. Рівняння (2.16) (воно відповідає ефективному спін- $\frac{1}{2}$ XX ланцюжку

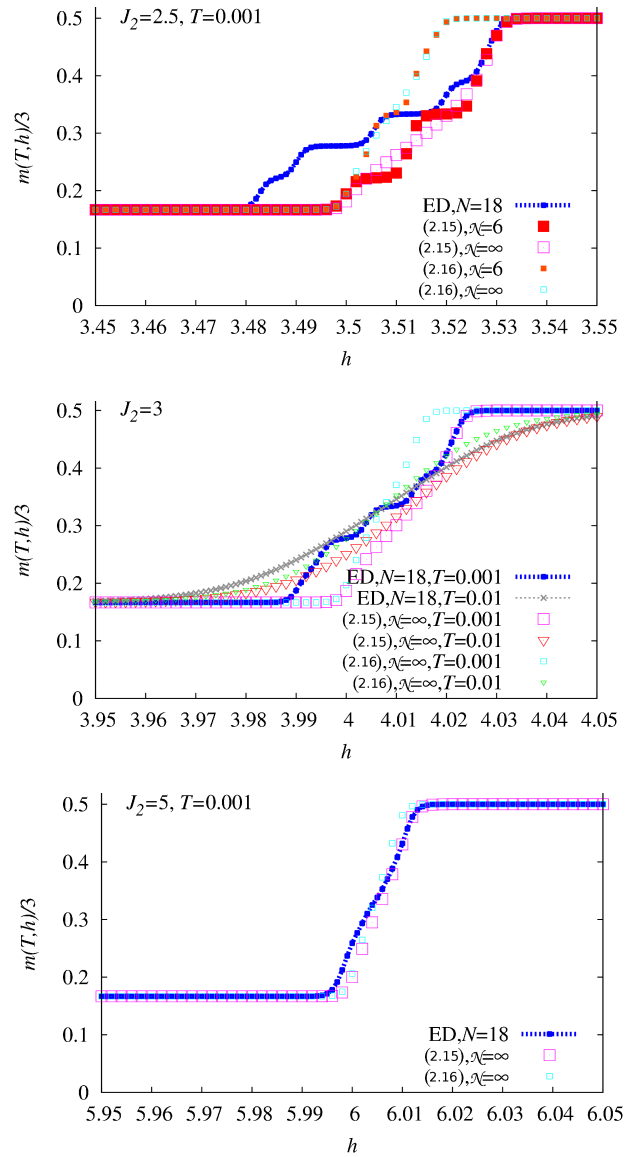


Рис. 2.4 Польова залежність кривих намагніченості $m(T, h)/3$ деформованого ромбічного ланцюжка [$J_1 = 0.85$, $J_2 = 2.5$ (верхня панель), $J_2 = 3$ (середня панель), $J_2 = 5$ (нижня панель), $J_3 = 1.15$, $J_m = 0$] при $T = 0.001$ (тонка лінія, квадрати) та $T = 0.01$ (тонка лінія, трикутники). Дані точної діагоналізації для $N = 18$: лінії; наближена аналітична теорія, яка використовує рівняння (2.15): великі порожні ($\mathcal{N} \rightarrow \infty$) і заповнені ($\mathcal{N} = 6$) символи; наближена аналітична теорія, яка використовує рівняння (2.16): маленькі порожні ($\mathcal{N} \rightarrow \infty$) та заповнені ($\mathcal{N} = 6$) символи.

в поперечному полі, представленому у роботі [56]) відтворює дані точної діагоналізації для $|J_1 - J_3|/J_2 = 0.12, 0.10$ лише якісно; величина поля насичення є занижена, кінцеве поле для плато $\frac{1}{3}$ становить h_1 і є перебільшеним. Рівняння (2.15) працює значно краще для $|J_1 - J_3|/J_2 = 0.12, 0.10$ і краще узгоджується з даними точної діагоналізації вище і трохи нижче поля насичення. Однак, кінцеве поле для плато $\frac{1}{3}$ знову дорівнює h_1 . Поблизу h_1 обидва наближення (2.15) та (2.16) мають схожі недоліки. Для меншого значення $|J_1 - J_3|/J_2 = 0.06$ узгодження між двома наближеннями і даними точної діагоналізації стає кращим. Це не дивно, так як рівняння (2.16) відповідає другому порядку теорії збурень відносно $|J_1|/J_2, |J_3|/J_2$, див. [56].

2.3. Криві намагніченості для азуриту

Як вже згадувалось в першому розділі даної дисертації, магнітні властивості природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ можуть бути описані моделлю Гайзенберга на деформованому фрустрованому ромбічному ланцюжку з параметрами обмінних взаємодій (1.1) та гіромагнітним відношенням $g = 2.06$, див. [55, 56, 58]. Магнітне поле h , яке фігурує в рівняннях (2.1) та (2.2) пов'язане зі справжнім фізичним магнітним полем $\mathcal{H}$, виміряним в теслах, співвідношенням $h = g\mu_B\mathcal{H}$ з $\mu_B \approx 0.67171$ К/Т, див. [56].

Надалі обговоримо низькотемпературну частину кривої намагніченості, яка проявляє майже вертикальний перехід від $\frac{1}{3}$ значення насичення до значення насичення в магнітному полі в околі 30 Т і при температурі близько 0.1 К. Ця особливість кривої намагніченості з'являється внаслідок домінуючого вкладу локалізованих магنونів у термодинамічні властивості у сильних магнітних полях та при низьких температурах.

Беручи до уваги засади концепції локалізованих магنونів на ідеальному ромбічному спіновому ланцюжку, для азуриту можемо очікувати, що стани з найменшою енергією з різними $S^z = N/2, \dots, N/2 - \mathcal{N}$ в магнітному полі побли-

зу поля насичення мають майже однакову енергію. Це й справді стане причиною появи майже вертикального стрибка низькотемпературної намагніченості в околі поля насичення. Однак, завдяки неідеальній геометрії стани з найменшою енергією не є строго локалізованими магнонами (які дають вертикальний стрибок в кривій намагніченості при $T = 0$), а є майже локалізованими магнонами і їх вплив на низькотемпературну термодинаміку в сильних магнітних полях можна знайти з рівняння (2.11).

Перед застосуванням підходу, заснованого на рівнянні (2.11), до моделі азуриту варто підкреслити наступне. Насамперед зазначимо, що згідно з формулою (2.1) $(J_1 - J_3)/J_2 = 0.26$, що є не настільки малим, як у випадках, приведених на рис. 2.4 (там було $|J_1 - J_3|/J_2 = 0.12, 0.10, 0.06$ для верхньої, середньої та нижньої панелей, відповідно). Крім того, тепер і $J_m/J_2 = 0.14 \neq 0$. Очевидно, за цих умов можна засумніватися в точності підходу, заснованого на формулі (2.11). Але обчислення продемонструвало, що наближений підхід працює добре навіть за цих умов. Після підстановки параметрів обмінних взаємодій для азуриту в рівняння (2.15) з $\varepsilon_1(\kappa)$ з рівнянь (2.11) (дуже великі квадрати), (2.15) (великі квадрати) та (2.16) (малі квадрати) ми отримали результати, показані на рис. 2.5. Їх можна порівняти з експериментальними даними для азуриту (див. рис. 1.5). На цьому ж рисунку приведено дані точної діагоналізації для $N = 18$ вузлів з якими і слід порівнювати результати наближеної аналітичної теорії. При низькій температурі $T = 0.08$ К (ліва панель на рис. 2.5) отримані результати є в добрій згоді з експериментальними даними, див. на рис. 2.5 результати наближеної аналітичної теорії та дані точної діагоналізації. Наближені аналітичні результати, які використовують $\varepsilon_1(\kappa)$ з рівняння (2.11) дуже добре узгоджуються з даними точної діагоналізації вище 33.5 Т, однак передбачають плато $\frac{1}{3}$ вже нижче 32 Т, тоді як передбачення точної діагоналізації – близько 31 Т. Криві намагніченості з $\varepsilon_1(\kappa)$ з рівнянь (2.15) та (2.16) відтворюють дані точної діагоналізації лише якісно. Крім того, трохи вище 32 Т наближені ана-

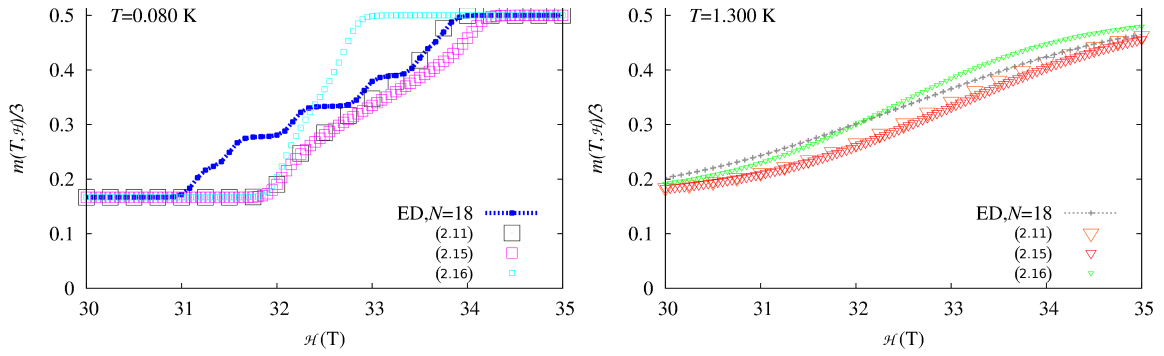


Рис. 2.5 Крива намагніченості $m(T, h)/3$ деформованого фрустрованого ромбічного ланцюжка в залежності від зовнішнього магнітного поля $\mathcal{H}$ для $T = 0.08$ К (ліва панель) та $T = 1.3$ К (права панель) ; параметри обмінної взаємодії для азуриту: $J_1 = 15.51$ К, $J_2 = 33$ К, $J_3 = 6.93$ К, $J_m = 4.62$ К, а гіромагнітне відношення $g = 2.06$. Дані точної діагоналізації для ромбічного ланцюжка з $N = 18$ вузлів: лінії, результати наближеної теорії з рівняння (2.11): дуже великі порожні символи, результати наближеної теорії з рівняння (2.15): великі порожні символи, результати наближеної теорії з рівняння (2.16): малі порожні символи.

літичні результати (2.11), (2.15) та (2.16) збігаються. При температурі $T = 1.3$ К (права панель рис. 2.5) результати наближеної теорії є близькими як між собою, так і з даними точної діагоналізації.

2.4. Висновки

Запропоновано евристичний анзац для статистичної суми деформованого фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка. Це дозволило отримати вільну енергію деформованого ромбічного спінового ланцюжка. Конкретніше, у цьому дослідженні вважалося, що статистична сума у випадку дещо деформованої геометрії має таку ж форму як і у випадку ідеальної геометрії, але з “трошки дисперсними” однамагнетонними енергіями $\varepsilon_1(\kappa)$, а саме

$$Z(T, h, N) = e^{-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}} \prod_{\kappa} \left(1 + e^{\frac{-\varepsilon_1(\kappa) - h}{T}}\right), \quad (2.23)$$

де $\varepsilon_1(\kappa)$ є найменшим розв'язком кубічного рівняння:

$$\begin{aligned}\varepsilon_i^3(\kappa) + a\varepsilon_i^2(\kappa) + b\varepsilon_i(\kappa) + c &= 0, \\ a &= 4J + J_2 + 2J_m \sin^2 \frac{\kappa}{2}, \\ b &= -2 \left(J^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} + \delta^2 \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right) + 2(2J + J_2) \left(J + J_m \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right) + J(J + J_2), \\ c &= -(2J + J_2) \left(J^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} + \delta^2 \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right) - J_2 \left(J^2 \cos^2 \frac{\kappa}{2} - \delta^2 \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right) \\ &\quad + 2J(J + J_2) \left(J + J_m \sin^2 \frac{\kappa}{2} \right)\end{aligned}\tag{2.24}$$

(воно виникає при знаходженні одномагнетонного спектру у випадку комірки, котра містить три вузли). Тобто,

$$\begin{aligned}\varepsilon_1(\kappa) &= -2\sqrt{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\alpha - \pi}{3} - \frac{a}{3}, \\ p &= -\frac{a^2}{3} + b, \quad q = \frac{2a^3}{27} - \frac{ab}{3} + c, \\ \cos \alpha &= -\frac{q}{2\sqrt{-\frac{p^3}{27}}}.\end{aligned}\tag{2.25}$$

Для малого δ/J_2 замість рівняння (2.25) можемо взяти $\varepsilon_1(\kappa)$ з рівняння (2.15). Крім того, якщо припустити, що J/J_2 , J_m/J_2 теж малі, то ми одержимо рівняння (2.16). Хоча (2.25) для $\varepsilon_1(\kappa)$ дає кращі результати, рівняння (2.16) для $\varepsilon_1(\kappa)$ (дійсне для $J/J_2 \ll 1$, $J_m/J_2 \ll 1$) дозволяє дуже прозору інтерпретацію термодинаміки з точки зору появи спін- $\frac{1}{2}$ XX ланцюжка в поперечному магнітному полі (2.20) і пов'язує наші результати, з результатами, які були отримані раніше в рамках абсолютно іншого підходу [56].

Розроблений опис може відворювати особливості процесу намагнічування в сильних магнітних полях та при низьких температурах навіть кількісно. В рамках запропонованої схеми можна розглянути і інші властивості, такі як низькотемпературна ентропія, теплоємність або магнітокалоричний ефект поблизу поля насичення. Відомо, що відхилення від ідеальної геометрії може привести до цікавої низькотемпературної поведінки, наприклад, ентропії навколо поля насичення [10, 11, 38, 41].

Очевидно, що такий опис може бути застосовано до інших спінових систем цього ж класу універсальності [10, 11, 38, 41, 44], наприклад, для димер-плакетного ланцюжка [86] або для двовимірної ґратки квадратне кагоме [95–97].

Слід відзначити, що незважаючи на те, що запропонований підхід забезпечує напівкількісний опис низькотемпературних властивостей деформованого ромбічного ланцюжка в сильному магнітному полі, залишається незрозумілим яким чином він може бути систематично поліпшеним. Тому далі обговорюємо інший підхід – теорію збурень, яка, однак, будуватиметься не відносно малих $|J_1|/J_2$, $|J_3|/J_2$, а відносно малих $|J_1 - J_3|/J_2$.

РОЗДІЛ 3

КВАНТОВИЙ АНТИФЕРОМАГНЕТИК ГАЙЗЕНБЕРГА З МАЙЖЕ БЕЗДИСПЕРСІЙНОЮ ОДНОМАГНОННОЮ ЗОНОЮ

В цьому розділі розглядається стандартна $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітна модель Гайзенберга в магнітному полі з гамільтоніаном

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \quad S^z = \sum_{i=1}^N s_i^z, \quad J_{ij} > 0, \quad (3.1)$$

де перша сума береться за всіма сусідніми вузлами однієї з трьох ґраток (див. нижче), тоді як друга сума пробігає всі N вузлів ґратки (порівняй з гамільтоніаном у рівнянні (2.1), який стосувався деформованого фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка з рис. 2.1).

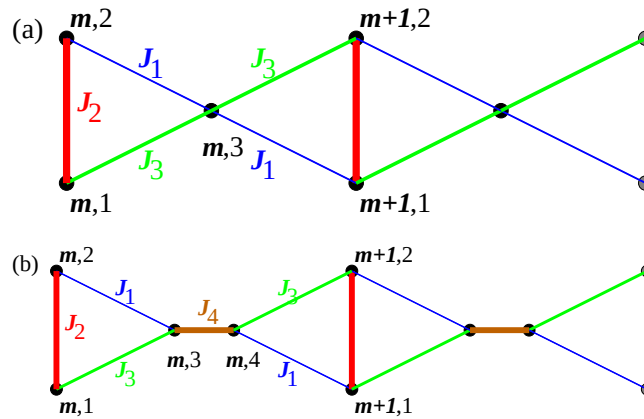


Рис. 3.1 (а) Ромбічний [82–85] та (б) димер-плакетний [86–94] спінові ланцюжки, які описуються гамільтоніаном (3.1).

Значення обмінних взаємодій J_{ij} для трьох різних ґраток показані на рис. 3.1 і рис. 3.2. J_2 є найбільшою обмінною взаємодією. Для конкретної ґратки локалізований магнонний стан зосереджений в межах малої частини ґратки – пас-

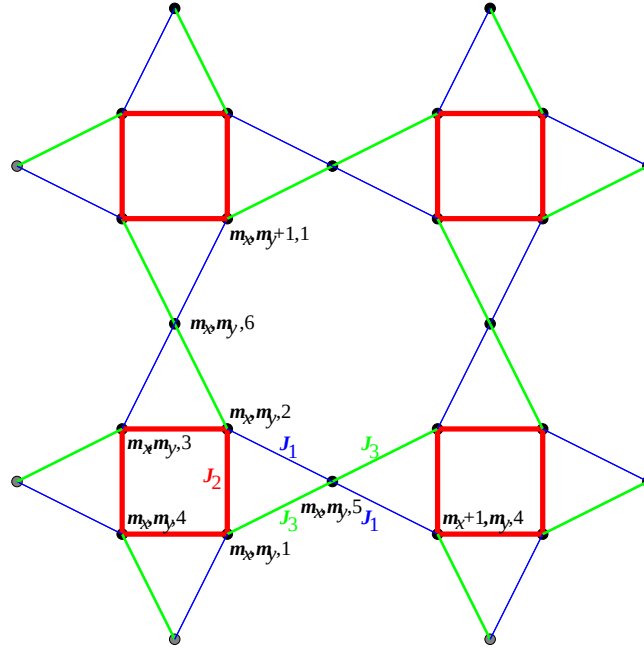


Рис. 3.2 Гратка квадратне кагоме [95–98], яка описується гамільтоніаном (3.1).

тки. Для ромбічного та димер-плакетного спінових ланцюжків пасткою є вертикальний зв'язок, а для гратки квадратне кагоме — квадрат. У підпросторах $S^z = N/2 - 2, \dots, N/2 - n_{\max}$, $n_{\max} \propto N$ можемо побудувати багатоманонні стани, заповнюючи пастки локалізованими магнонами. Очевидно, що всі ці багатоманонні стани є лінійно незалежними [99].

Кратність виродження локалізованих магнонних станів обчислюється шляхом відображення цих станів на конфігурації жорстких об'єктів на допоміжній гратці [10, 11, 38, 41]. Для фрустрованих квантових антиферромагнетиків на гратках, що показані на рис. 3.1 і рис. 3.2, це є газ мономерів на ланцюжку або квадратній гратці [11, 38].

Важливо зауважити, що локалізація магнонів можлива завдяки специфічній геометрії гратки і, отже, вимагає певних співвідношень між зв'язками J_{ij} . А саме: для ромбічного спінового ланцюжка: $J_1 = J_3 = J$, $J_2 \geq J$; для димер-плакетного ланцюжка: $J_1 = J_3 = J_4 = J$, $J_2 \geq ((1 + \sqrt{5})/2)J$; для гратки квадратне кагоме: $J_1 = J_3 = J$, $J_2 \geq J$. При низьких температурах і для магнітних полів h в околі поля насичення $h_{\text{sat}} = h_1$ ($h_1 = J_2 + J$ для ром-

бічного і димер-плакетного ланцюжків і $h_1 = 2J_2 + J$ для ґратки квадратне кагоме) внесок у статистичну суму локалізованих станів є домінуючим [38]. У цьому дослідженні маємо справу з випадком, коли умови локалізації магнонів порушуються. А саме, будемо розглядати порушення ідеальної геометрії з урахуванням різних значень J_1 і J_3 , але з зафіксувавши їх середнє значення, тобто $J_1 \neq J_3$, $J_1 + J_3 = 2J$ (див. рис. 3.1 і рис. 3.2).

В подальшому будемо нумерувати вузли парою індексів, де перший індекс нумеруватиме комірки ($m = 1, \dots, \mathcal{N}$, $\mathcal{N} = N/3$ для ромбічного ланцюжка, $\mathcal{N} = N/4$ для димер-плакетного ланцюжка, $\mathcal{N} = N/6$ для ґратки квадратне кагоме, N - число вузлів; для ґратки квадратне кагоме комірки нумерує вектор $\mathbf{m} = (m_x, m_y)$), а другий індекс позначає положення вузла в комірці.

3.1. Побудова ефективних гамільтоніанів. Наближення сильного зв'язку

Почнімо з $s = \frac{1}{2}$ антиферомагнітної моделі Гайзенберга на ромбічному ланцюжку (рис.3.1 а). Гамільтоніан системи (3.1) записується таким чином:

$$H = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} (J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} + J_3 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} + J_3 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,2} - h (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z)) . \quad (3.2)$$

Наближення сильного зв'язку (див. [55–57]) базується на припущенні, що обмінна взаємодія Гайзенберга J_2 є найбільшою, тобто $J_i/J_2 \ll 1$, $i \neq 2$. В сильних магнітних полях тільки два з чотирьох станів на кожному вертикальному зв'язку беруться до уваги, а саме, повністю поляризований стан

$$|u\rangle = |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle$$

і одномагнонний стан

$$|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle) .$$

Тут 1 і 2 нумерують вузли на вертикальному зв'язку. Оскільки J_2 є найбільшою (домінуючою) взаємодією, гамільтоніан H розбиваємо на “основну частину” H_{main} (гамільтоніан, який описує всі комірки і взаємодію Зеємана всіх спінів з магнітним полем $h_0 = J_2$) і на “збурення” V , $H = H_{\text{main}} + V$. При цьому

$$\begin{aligned} H_{\text{main}} &= J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} - J_2 (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z), \\ V &= J_3 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} + J_3 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,3} \\ &\quad - (h - h_0) (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z). \end{aligned} \quad (3.3)$$

Якщо $h = J_2$ і $J_1 = J_3 = 0$, то $H = H_{\text{main}}$. Основний стан H_{main} позначимо $|\varphi_0\rangle$. Він є $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений. Справді,

$$|\varphi_0\rangle = \prod_m (|v\rangle |\uparrow_3\rangle)_m, \quad (3.4)$$

де $|v\rangle$ є або компонента триплету $|u\rangle = |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle$, або синглет

$|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)$. Енергія основного стану (3.4) — $\varepsilon_0 = -5J_2/(4\mathcal{N})$.

Далі, розділяємо гільбертовий простір, у якому діє H (3.2), на модельний простір $\mathcal{H}_0$ і на простір $\mathcal{H} \setminus \mathcal{H}_0$. Введемо оператор проектування P ($P^2 = P$) на простір $\mathcal{H}_0$:

$$\begin{aligned} P &= \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} P_m, \\ P_m &= \mathcal{P}_m \otimes (|\uparrow_3\rangle \langle \uparrow_3|)_m, \mathcal{P}_m = (|u\rangle \langle u| + |d\rangle \langle d|)_m. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Для $J_i \neq 2$, $i \neq 2$ і $h - h_0 \neq 0$ будемо ефективний гамільтоніан, який діє тільки на модельний простір, але дає точну енергію основного стану. Його можна знайти з рівняння [100–104] (див. також додаток Д.1)

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots \quad (3.6)$$

Обчислимо всі доданки в правій стороні рівняння (3.6). Очевидно, що $PHP = PH_{\text{main}}P + PVP$. Оскільки

$$(J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} - h(s_1^z + s_2^z))|u\rangle = \left(\frac{1}{4}J_2 - h\right)|u\rangle, \quad (3.7)$$

$$(J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} - h(s_1^z + s_2^z))|d\rangle = -\frac{3}{4}J_2|d\rangle, \quad (3.8)$$

то

$$PH_{\text{main}}P = P \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(|u\rangle \left(\frac{1}{4}J_2 - h \right) \langle u| + |d\rangle \left(-\frac{3}{4}J_2 \right) \langle d| - \frac{1}{2}h \right)_m P. \quad (3.9)$$

Після введення (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ операторів

$$\begin{aligned} 1 &= |u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|, \quad T^z = \frac{1}{2}(|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|), \\ |u\rangle\langle u| &= \frac{1}{2} + T^z, \quad |d\rangle\langle d| = \frac{1}{2} - T^z, \end{aligned} \quad (3.10)$$

для $PH_{\text{main}}P$ отримаємо

$$PH_{\text{main}}P = P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left(-\frac{1}{4}J_2 - h - (h - J_2) T_{\mathbf{m}}^z \right) P \quad (3.11)$$

з $h = J_2$. Очевидно, що якщо $h = J_2$, то $PH_{\text{main}}P = \varepsilon_0 P$. Далі,

$$\begin{aligned} PV P &= P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left(|u\rangle_m \left(\frac{J_3}{4} \right) \langle u|_m + |u\rangle_m \left(\frac{J_1}{4} \right) \langle u|_m \right. \\ &\quad \left. + |u\rangle_{m+1} \left(\frac{J_1}{4} \right) \langle u|_{m+1} + |u\rangle_{m+1} \left(\frac{J_3}{4} \right) \langle u|_{m+1} \right. \\ &\quad \left. - (h - J_2) \left(|u\rangle_m \langle u|_m + \frac{1}{2} \right) \right) P \\ &= P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{J_1 + J_3}{4} - h + J_2 + \left(\frac{J_1 + J_3}{2} - h + J_2 \right) T_{\mathbf{m}}^z \right) P. \end{aligned} \quad (3.12)$$

Об'єднуючи рівняння (3.11) і (3.12), маємо

$$\begin{aligned} PHP &= P \sum_{\mathbf{m}} \left(-\frac{J_2}{4} - h + \frac{J}{2} - (h - h_1) T_{\mathbf{m}}^z \right) P, \\ h_1 &= J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \end{aligned} \quad (3.13)$$

Розглянемо тепер другий доданок в рівнянні (3.6). Хоча ми знаємо всі власні стани $|\varphi_\alpha\rangle$ і відповідні власні значення ε_α гамільтоніана H_{main} , в межах цього

наближення лише частина з них даватиме внесок у другий доданок у (3.6). Знайдемо ці стани $|\varphi_\alpha\rangle$. Для цього подіємо гамільтоніаном V на стан $|\varphi_0\rangle$:

$$\begin{aligned} V \dots (|d\rangle|\uparrow\rangle)_m \dots &= \dots (|u\rangle|\downarrow\rangle)_m \dots, \\ V \dots (|d\rangle|\uparrow\rangle)_m \dots &= \dots (|u\rangle|\uparrow\rangle)_m \dots \end{aligned} \quad (3.14)$$

Тому, розглядаємо $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}}$ збуджених станів

$$|\varphi_\alpha\rangle = (|v\rangle|\uparrow_3\rangle)_1 \dots (|v\rangle|\downarrow_3\rangle)_m \dots (|v\rangle|\uparrow_3\rangle)_{\mathcal{N}}, \quad (3.15)$$

тобто стани з одним перевернутим спіном на вузлі, який з'єднує дві сусідні комірки. Енергія цих станів є

$$\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + h,$$

де $h = J_2$.

Розглянемо детальніше дію збурення V (3.3) на збуджені стани $|\varphi_\alpha\rangle$. Маємо

$$\begin{aligned} &\left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^+ s_{m,3}^- + s_{m,1}^- s_{m,3}^+) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^+ s_{m,3}^- + s_{m,2}^- s_{m,3}^+) \right. \\ &+ \frac{J_1}{2} (s_{m,3}^+ s_{m+1,1}^- + s_{m,3}^- s_{m+1,1}^+) + \frac{J_3}{2} (s_{m,3}^+ s_{m+1,2}^- + s_{m,3}^- s_{m+1,2}^+) \left. \right) \\ &\times \dots (|v\rangle|\downarrow_3\rangle)_m (|v\rangle|\uparrow_3\rangle)_{m+1} \dots \\ &= \left(\frac{J_3}{2} s_{m,1}^- + \frac{J_1}{2} s_{m,2}^- + \frac{J_1}{2} s_{m+1,1}^- + \frac{J_3}{2} s_{m+1,2}^- \right) \dots (|v\rangle|\uparrow_3\rangle)_m (|v\rangle|\uparrow_3\rangle)_{m+1} \dots; \\ &\dots (\langle v|\langle\uparrow_3|)_{m+1} (\langle v|\langle\downarrow_3|)_m \dots \left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^+ s_{m,3}^- + s_{m,1}^- s_{m,3}^+) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^+ s_{m,3}^- + s_{m,2}^- s_{m,3}^+) \right. \\ &\quad \left. + \frac{J_1}{2} (s_{m,3}^+ s_{m+1,1}^- + s_{m,3}^- s_{m+1,1}^+) + \frac{J_3}{2} (s_{m,3}^+ s_{m+1,2}^- + s_{m,3}^- s_{m+1,2}^+) \right) \\ &= \dots (\langle v|\langle\uparrow_3\rangle)_{m+1} (\langle v|\langle\uparrow_3\rangle)_m \dots \left(\frac{J_3}{2} s_{m,1}^+ + \frac{J_1}{2} s_{m,2}^+ + \frac{J_1}{2} s_{m+1,1}^+ + \frac{J_3}{2} s_{m+1,2}^+ \right). \end{aligned}$$

Тому

$$\begin{aligned}
& PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP \\
&= \frac{P}{-J_2} \sum_{\alpha \neq 0} \left(\left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^- + s_{m+1,2}^-) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^- + s_{m+1,1}^-) \right) P \right. \\
&\quad \left. \times P \left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^+ + s_{m+1,2}^+) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^+ + s_{m+1,1}^+) \right) \right) P.
\end{aligned} \tag{3.16}$$

Врахувавши, що

$$\begin{aligned}
Ps_1^- P &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle\langle u| = -\frac{1}{\sqrt{2}} T^-, \\
Ps_2^- P &= \frac{1}{\sqrt{2}} |d\rangle\langle u| = \frac{1}{\sqrt{2}} T^-, \\
Ps_1^+ P &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle\langle d| = -\frac{1}{\sqrt{2}} T^+, \\
Ps_2^+ P &= \frac{1}{\sqrt{2}} |u\rangle\langle d| = \frac{1}{\sqrt{2}} T^+,
\end{aligned} \tag{3.17}$$

де введено (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ оператори $T^\pm$, можемо записати другий доданок у рівнянні (3.6) так:

$$\begin{aligned}
PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP &= P \left(\frac{(J_1 - J_3)^2}{-8J_2} \sum_{\mathbf{m}} (T_m^- + T_{m+1}^-) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \right) P \\
&= P \left(-\frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2} \sum_{\mathbf{m}} (1 - 2T_m^z - 2(T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)) \right) P.
\end{aligned} \tag{3.18}$$

Остаточно отримаємо:

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= P \sum_{\mathbf{m}} (\mathcal{C} - \mathbf{h} T_{\mathbf{m}}^z - \mathbf{J} (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)) P, \\
\mathbf{J} &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2}, \\
\mathbf{h} &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2}, \\
\mathcal{C} &= -\frac{J_2}{4} - h + \frac{J}{2} - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2} \\
h_1 &= J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}.
\end{aligned} \tag{3.19}$$

Ефективний гамільтоніан в наближенні сильного зв'язку H_{eff} (3.19) відповідає нефрустрованому спін- $\frac{1}{2}$ ізотропному XY ланцюжку в поперечному магнітному полі [105, 106].

У випадку димер-плакетного спінового ланцюжка (див. рис. 3.1b) два істотні у режимі сильних полів стани на вертикальному зв'язку є такі самі, як і для ромбічного ланцюжка, однак оператор проектування є

$$P_m = \mathcal{P}_m \otimes (|\uparrow_3\rangle\langle\uparrow_3| \otimes |\uparrow_4\rangle\langle\uparrow_4|)_m,$$

де $\mathcal{P}_m$ (як і раніше) визначається з рівняння (3.5). Розглядаємо два класи збуджених станів: перший клас містить синглет на горизонтальному зв'язку, тобто $|s\rangle = (|\uparrow_3\downarrow_4\rangle - |\downarrow_3\uparrow_4\rangle) / \sqrt{2}$ з енергією $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 - J_4$; другий клас містить $S^z = 0$ компоненту триплетного стану на горизонтальному зв'язку, тобто $|t\rangle = (|\uparrow_3\downarrow_4\rangle + |\downarrow_3\uparrow_4\rangle) / \sqrt{2}$. Енергія цих збуджених станів є $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2$. В результаті для ефективного гамільтоніана в наближенні сильного зв'язку ми знову отримаємо спін- $\frac{1}{2}$ ізотропний XY ланцюжок в поперечному полі (3.19), однак з іншими параметрами (див. деталі обчислень у додатку Д.2.1):

$$\begin{aligned} J &= -\frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} \frac{J_4}{J_2}, \\ h &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} \frac{2J_2 - J_4}{J_2}, \\ C &= -\frac{3}{2}h - \frac{J_2}{4} + \frac{J_4}{4} + \frac{J}{2} - \frac{(J_1 - J_3)^2}{16(J_2 - J_4)} \frac{2J_2 - J_4}{J_2}, \\ h_1 &= J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \end{aligned} \tag{3.20}$$

При побудові ефективного гамільтоніана в наближенні сильного зв'язку для ґратки квадратне кагоме (рис. 3.2) беремо до уваги наступні два стани на кожному квадраті: стан

$$|u\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\rangle$$

з енергією $J_2 - 2h$ та стан

$$|d\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\downarrow_4\rangle - |\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3\uparrow_4\rangle + |\uparrow_1\downarrow_2\uparrow_3\uparrow_4\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\rangle)$$

з енергією $-J_2 - h$, $h_0 = 2J_2$. Для проектора P_m маємо:

$P_{\mathbf{m}} = \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \otimes (|\uparrow_5\rangle\langle\uparrow_5| \otimes |\uparrow_6\rangle\langle\uparrow_6|)_{\mathbf{m}}$, де $\mathcal{P}_{\mathbf{m}} = (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_{\mathbf{m}}$. Так як і у випадку ромбічного спінового ланцюжка, збуджені стани містять один перевернутий спін на тих вузлах, що з'єднують два сусідні квадрати і в горизонтальному, і у вертикальному напрямках. Енергія цих збуджених станів є $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + h_0 = \varepsilon_0 + 2J_2$. Провівши всі необхідні обчислення (див. додаток Д.3.1), з (3.6) отримаємо наступний результат

$$H_{\text{eff}} = J \sum_{(mn)} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) - \hbar \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \mathcal{N}C, \quad (3.21)$$

де

$$\begin{aligned} J &= -\frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2}, \\ \hbar &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2}, \\ C &= -\frac{5}{2}h + \frac{3}{2}J - \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2}, \\ h_1 &= 2J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \end{aligned} \quad (3.22)$$

Отриманий ефективний гамільтоніан (3.21) є спін- $\frac{1}{2}$ ізотропна XY модель на квадратній ґратці у поперечному магнітному полі.

3.2. Підхід локалізованих магнонів

Удосконалимо підхід сильного зв'язку. Розглянемо для початку ромбічний спіновий ланцюжок. Наближення сильного зв'язку передбачає, що взаємодія J_2 є набагато більшою, ніж J_1 і J_3 . Однак, ця вимога не є необхідною в картині локалізованих магнонів: у картині локалізованих магнонів $J_1 - J_3 = 0$,

але взаємодія $J_1 = J_3 = J$ є лише меншою (а не набагато меншою) ніж J_2 . Чи можна покращити підхід сильного зв'язку, виходячи з картини локалізованих магنونів? На перший погляд така теорія мала б виглядати так: в рамках підходу локалізованих магنونів братимемо до уваги тільки два стани на вертикальному зв'язку: $|u\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle$ і $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)$, однак розбиття гамільтоніана H відрізняється від (3.3), тобто $H = \tilde{H}_{\text{main}} + \tilde{V}$. Основною частиною гамільтоніана $\tilde{H}_{\text{main}}$ вважається та частина початкового гамільтоніана, яка відповідає ідеальній геометрії з $J = (J_1 + J_3)/2$ (замість J_1 і J_3) при $h = h_1$. Решта гамільтоніана розглядається як збурення $\tilde{V}$. Для $h = h_1$ і $J_1 = J_3 = J$ маємо $\mathcal{H} \rightarrow \mathcal{H}_{\text{main}}$. Основний стан гамільтоніана $\tilde{H}_{\text{main}}$ є відомий: це є незалежні локалізовані магтони. Однак, збуджені стани, які необхідні для обчислення другого доданку в рівнянні (3.6) залишаються невідомими.

Цю трудність можна оминати, якщо розглядати не H , а гамільтоніан

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}H\mathcal{P}, \quad \mathcal{P} = \bigotimes_{m=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{P}_m, \quad \mathcal{P}_m = (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_m, \quad (3.23)$$

де $\mathcal{P}$ — оператор проектування на стани $|u\rangle$ і $|d\rangle$ комірок $m = 1, \dots, \mathcal{N}$.

Відзначимо, що оператор проектування P (3.5), який використовується в наближенні сильного зв'язку, відрізняється від проектора $\mathcal{P}$ у (3.23). Перейшовши від H до $\mathcal{H}$, ми зробили наближення, зменшивши кількість станів, які беруться до уваги (замість чотирьох станів на кожному вертикальному зв'язку розглядаємо тільки два з них — повністю поляризований стан $|u\rangle$ і стан локалізованого магнона $|d\rangle$).

Далі, розділяємо $\mathcal{H}$ на основну частину $\mathcal{H}_{\text{main}}$ (тобто гамільтоніан $\mathcal{H}$ з $J_1 = J_3 = J$ і $h = h_1$) і збурення $\mathcal{V} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_{\text{main}}$. Основний стан $\mathcal{H}_{\text{main}}$ такий самий, як і у наближенні сильного зв'язку $|\varphi_0\rangle$ (хоча й з іншим значенням енергії основного стану ε_0), а отже і проектор на простір $\mathcal{H}_0$ такий самий: $P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$. Крім того, для гамільтоніана $\mathcal{H}_{\text{main}}$ відомі всі збуджені стани $|\varphi_\alpha\rangle$, $\alpha \neq 0$, а тому можемо розрахувати ефективний гамільтоніан згідно з формулою (3.6).

Для ромбічного ланцюжка з рис. 3.1а маємо:

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_{\text{main}} &= \sum_m \tilde{h}_m, \\
\tilde{h}_m &= J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} + J \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} \\
&\quad + J \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,2} - h_1 (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z), \\
\tilde{V} &= \sum_m \tilde{v}_m, \\
\tilde{v}_m &= \frac{J_1 - J_3}{2} \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} - \frac{J_1 - J_3}{2} \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} \\
&\quad + \frac{J_1 - J_3}{2} \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} - \frac{J_1 - J_3}{2} \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,2} \\
&\quad - (h - h_1) (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z).
\end{aligned} \tag{3.24}$$

Гамільтоніан $\mathcal{H}$ матиме вигляд:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} - (h - J_2) T_m^z - (h - J) s_{m,3}^z \right. \\
&\quad + \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (T_m^x s_{m,3}^x + T_m^y s_{m,3}^y) + J T_m^z s_{m,3}^z \\
&\quad \left. - \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (s_{m,3}^x T_{m+1}^x + s_{m,3}^y T_{m+1}^y) + J s_{m,3}^z T_{m+1}^z \right].
\end{aligned} \tag{3.25}$$

Далі, розглядаємо основний гамільтоніан

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{main}} &= \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[-\frac{h_1}{2} - \frac{J_2}{4} - (h_1 - J_2) T_m^z - (h_1 - J) s_{m,3}^z \right. \\
&\quad \left. + J (T_m^z s_{m,3}^z + s_{m,3}^z T_{m+1}^z) \right],
\end{aligned} \tag{3.26}$$

де $h_1 = J_2 + J$. Це є гамільтоніан ланцюжка Ізинга з відомими власними станами $|\varphi_\alpha\rangle$.

Набір основних станів $\prod_m (|v\rangle |\uparrow_3\rangle)_m$, де $v \in u$, або d , має енергію $\varepsilon_0 = (-5J_2/4 - J/2)\mathcal{N}$. Збурення $\mathcal{V} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_{\text{main}}$ має наступний вигляд

$$\mathcal{V} = \mathcal{P} \left(\frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} \sum_m (T_m^x s_{m,3}^x + T_m^y s_{m,3}^y - s_{m,3}^x T_{m+1}^x + s_{m,3}^y T_{m+1}^y) \right) \mathcal{P}. \tag{3.27}$$

Збуджені стани $|\varphi_\alpha\rangle$, які входять у рівняння (3.6), легко встановити. Це знову стани з одним перевернутим спіном на вузлі $m, 3$, який з'єднує дві сусідні комірки. Але оскільки тепер $J \neq 0$, то енергія збуджених станів залежить від станів на сусідніх вертикальних зв'язках. А саме:

$$\begin{aligned}\mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|u\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |u\rangle_{m+1} \dots &= (\varepsilon_0 + J_2 - J) \dots (|u\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |u\rangle_{m+1} \dots, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|u\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |d\rangle_{m+1} \dots &= (\varepsilon_0 + J_2) \dots (|u\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |d\rangle_{m+1} \dots, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|d\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |u\rangle_{m+1} \dots &= (\varepsilon_0 + J_2) \dots (|d\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |u\rangle_{m+1} \dots, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|d\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |d\rangle_{m+1} \dots &= (\varepsilon_0 + J_2 + J) \dots (|d\rangle|\downarrow_3\rangle)_m |d\rangle_{m+1} \dots.\end{aligned}$$

Знаючи всі збуджені стани, можемо знайти ефективний гамільтоніан згідно з (3.6). Маємо

$$\begin{aligned}P\mathcal{V}\sum_{\alpha\neq 0}\frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0-\varepsilon_\alpha}\mathcal{V}P &= P\left(-\frac{(J_1-J_3)^2}{16J_2}\right) \\ &\times \sum_m \left(\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} + T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} + T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \right. \\ &+ (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} + T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} - T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\ &+ (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} - T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} + T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\ &\left. + \frac{1}{1+\frac{J}{J_2}} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} - T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} - T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \right) P.\end{aligned}\tag{3.28}$$

Використавши рівності

$$T^-(1/2 + T^z) = T^-,$$

$$T^-(1/2 - T^z) = 0,$$

$$(1/2 + T^z)T^+ = T^+,$$

$$(1/2 - T^z)T^+ = 0,$$

можемо переписати рівняння (3.28) наступним чином:

$$P\mathcal{V}\sum_{\alpha\neq 0}\frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0-\varepsilon_\alpha}\mathcal{V}P=P\left(\left(-\frac{(J_1-J_3)^2}{16J_2}\right)\sum_m\left(\left(\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}}+1\right)-2T_m^z\right.\right. \\ \left.\left.+2\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}}(T_m^xT_{m+1}^x+T_m^yT_{m+1}^y)-2\left(\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}}-1\right)T_m^zT_{m+1}^z\right)\right)P. \quad (3.29)$$

Остаточний результат для ефективного гамільтоніана є таким:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}}=\sum_{m=1}^{\mathcal{N}}\left[\mathcal{J}(T_m^xT_{m+1}^x+T_m^yT_{m+1}^y)+\mathcal{J}^zT_m^zT_{m+1}^z-\mathcal{h}T_m^z+\mathcal{C}\right], \quad (3.30)$$

де константи мають наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \mathcal{J} &= \frac{(J_1-J_3)^2}{4J_2}\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}}, \\ \mathcal{J}^z &= \frac{(J_1-J_3)^2}{4J_2}\left(\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}}-1\right), \\ \mathcal{h} &= h-h_1-\frac{(J_1-J_3)^2}{4J_2}, \\ \mathcal{C} &= -h-\frac{J_2}{4}+\frac{J}{2}-\frac{(J_1-J_3)^2}{16J_2}\left(\frac{1}{1-\frac{J}{J_2}}+1\right), \\ J &= \frac{J_1+J_3}{2}, \quad h_1=J_2+J. \end{aligned} \quad (3.31)$$

Отриманий ефективний гамільтоніан (3.30) є гамільтоніаном спінів- $\frac{1}{2}$ XXZ ланцюжка Гайзенберга. Це одна з стандартних моделей статистичної механіки, яка може бути досліджена такими методами як підстановка Бете [107], точна діагоналізація, квантове Монте Карло або метод ренормалізаційної групи для матриці густини [108].

Можемо в рівнянні (3.31) провести розклад в ряд відносно J/J_2 :

$$\begin{aligned} J &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} \left(1 + \frac{J}{J_2} + \dots \right), \\ J^z &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} \left(\frac{J}{J_2} + \dots \right), \\ h &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2}. \end{aligned}$$

Цей результат відтворює не тільки другий порядок теорії збурень у наближенні сильного зв'язку, який приведений в роботах [55, 56], а й третій порядок теорії збурень в [55], див. рівняння (6.3) в роботі [55].

Знайдемо тепер ефективний гамільтоніан у підході, що використовує теорію локалізованих магнонів, для димер-плакетного ланцюжка, див. рис. 3.1b. Гамільтоніан $\mathcal{H}$ записується так

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} & \left[-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} - (h - J_2) T_m^z \right. \\ & - \left(h - \frac{J}{2} \right) (s_{m,3}^z + s_{m,4}^z) + \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (T_m^x s_{m,3}^x + T_m^y s_{m,3}^y) + J T_m^z s_{m,3}^z \\ & \left. + J_4 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m,4} - \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (s_{m,4}^x T_{m+1}^x + s_{m,4}^y T_{m+1}^y) + J s_{m,4}^z T_{m+1}^z \right]. \end{aligned} \quad (3.32)$$

Далі,

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{main}} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} & \left[-\frac{h_1}{2} - \frac{J_2}{4} - (h_1 - J_2) T_m^z - \left(h_1 - \frac{J}{2} \right) (s_{m,3}^z + s_{m,4}^z) \right. \\ & \left. + J T_m^z s_{m,3}^z + J_4 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m,4} + J s_{m,4}^z T_{m+1}^z \right], \end{aligned} \quad (3.33)$$

де $h_1 = J_2 + J$. Це є гамільтоніан одновимірної моделі ланцюжка Ізинга-Гайзенберга [141]. Розглянемо тепер збурення $\mathcal{V}$ і збуджені стани $|\varphi_\alpha\rangle$. Якщо два сусідні вертикальні зв'язки є в стані з $T^z = 1/2$, то перший збуджений стан $|\dots(|u\rangle|s\rangle)_m(|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 - J_4$, інший збуджений стан $|\dots(|u\rangle|t\rangle)_m(|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2$. Аналогічно,

якщо два сусідні вертикальні зв'язки мають $T^z = -1/2$, то збуджений стан $|\dots(|d\rangle|s\rangle)_m(|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 - J_4 + J$, а збуджений стан $|\dots(|d\rangle|t\rangle)_m(|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 + J$. Крім того, якщо $T_m^z = 1/2$ і $T_{m+1}^z = -1/2$, збуджений стан $|\dots(|u\rangle|s_{ud}\rangle)_m(|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$, $|s_{ud}\rangle = (|s\rangle + x|t\rangle)/\sqrt{1+x^2}$, $x = (J_4 - \sqrt{J_4^2 + J^2})/J$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 - \sqrt{J_4^2 + J^2}/2$, а інший – $|\dots(|u\rangle|t_{ud}\rangle)_m(|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$, $|t_{ud}\rangle = (-x|s\rangle + |t\rangle)/\sqrt{1+x^2}$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 + \sqrt{J_4^2 + J^2}/2$. Якщо $T_m^z = -1/2$ і $T_{m+1}^z = 1/2$, то збуджений стан $|\dots(|d\rangle|s_{du}\rangle)_m(|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$, $|s_{du}\rangle = (|s\rangle - x|t\rangle)/\sqrt{1+x^2}$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 - \sqrt{J_4^2 + J^2}/2$, тоді як збуджений стан $|\dots(|d\rangle|t_{du}\rangle)_m(|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1}\dots\rangle$, $|t_{du}\rangle = (x|s\rangle + |t\rangle)/\sqrt{1+x^2}$ має енергію $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 + \sqrt{J_4^2 + J^2}/2$. Беручи до уваги всі ці формули, знову отримаємо ефективний гамільтоніан (3.30), який відповідає спін- $\frac{1}{2}$ XXZ ланцюжку в полі вздовж осі z , однак з іншими константами

$$\begin{aligned}
J &= -\frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} + \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2}, \\
J^z &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} \left[1 - \frac{1}{1 + \frac{J+J_4-\sqrt{J_4^2+J^2}}{2(J_2-J_4)}} \frac{(1-x)^2}{1+x^2} \right] \\
&\quad + \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2} \left[1 - \frac{1}{1 + \frac{J-J_4+\sqrt{J_4^2+J^2}}{2J_2}} \frac{(1+x)^2}{1+x^2} \right], \\
h &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} \frac{1}{1 + \frac{J+J_4-\sqrt{J_4^2+J^2}}{2(J_2-J_4)}} \frac{(1-x)^2}{1+x^2} \\
&\quad - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2} \frac{1}{1 + \frac{J-J_4+\sqrt{J_4^2+J^2}}{2J_2}} \frac{(1+x)^2}{1+x^2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
C &= -\frac{3}{2}h - \frac{J_2}{4} + \frac{J}{2} + \frac{J_4}{4} \\
&- \frac{(J_1 - J_3)^2}{32(J_2 - J_4)} \left[1 + \frac{1}{1 + \frac{J+J_4-\sqrt{J_4^2+J^2}}{2(J_2-J_4)}} \frac{(1-x)^2}{1+x^2} \right] \\
&- \frac{(J_1 - J_3)^2}{32J_2} \left[1 + \frac{1}{1 + \frac{J-J_4+\sqrt{J_4^2+J^2}}{2J_2}} \frac{(1+x)^2}{1+x^2} \right], \\
J &= \frac{J_1 + J_3}{2}, \quad x = \frac{J_4 - \sqrt{J_4^2 + J^2}}{J}, \quad h_1 = J_2 + J.
\end{aligned} \tag{3.34}$$

Деталі цього обчислення приведені у додатку Д.2.2.

Розглянемо підхід локалізованих магнонів для ґратки квадратне кагоме. Гамільтоніан $\mathcal{H}$ має вигляд

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \sum_{\mathbf{m}} \left[-\frac{3}{2}h - (h - 2J_2) T_{\mathbf{m}}^z - \left(h - \frac{3}{2}J \right) (s_{\mathbf{m},5}^z + s_{\mathbf{m},6}^z) \right. \\
&\quad + \frac{J}{2} T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},5}^z + \frac{J_1 - J_3}{2} (T_{\mathbf{m}}^x s_{\mathbf{m},5}^x + T_{\mathbf{m}}^y s_{\mathbf{m},5}^y) \\
&\quad + \frac{J}{2} s_{\mathbf{m},5}^z T_{m_x+1, m_y}^z + \frac{J_1 - J_3}{2} (s_{\mathbf{m},5}^x T_{m_x+1, m_y}^x + s_{\mathbf{m},5}^y T_{m_x+1, m_y}^y) \\
&\quad + \frac{J}{2} T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},6}^z - \frac{J_1 - J_3}{2} (T_{\mathbf{m}}^x s_{\mathbf{m},6}^x + T_{\mathbf{m}}^y s_{\mathbf{m},6}^y) \\
&\quad \left. + \frac{J}{2} s_{\mathbf{m},6}^z T_{m_x, m_y+1}^z - \frac{J_1 - J_3}{2} (s_{\mathbf{m},6}^x T_{m_x, m_y+1}^x + s_{\mathbf{m},6}^y T_{m_x, m_y+1}^y) \right].
\end{aligned} \tag{3.35}$$

Гамільтоніан $\mathcal{H}_{\text{main}}$ отримується з рівняння (3.35) з $J_1 = J_3 = J$ і $h = h_1 = 2J_2 + J$. Стани з одним перевернутим спіном на вузлі, який з'єднує два квадрати, становлять набір збуджених станів. Енергія цих збуджених станів залежить від станів на цих двох квадратах, і набуває значення $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + 2J_2 - J$, якщо обидва квадрати є в стані $|u\rangle$, значення $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + 2J_2 - J/2$, якщо один квадрат є в стані $|u\rangle$, а інший в стані $|d\rangle$, і значення $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + 2J_2$, якщо обидва квадрати є в стані $|d\rangle$. Взявши це до уваги, повторюємо обчислення в другому доданку

рівняння (3.6) і отримуємо наступний гамільтоніан:

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{eff}} &= P \sum_{\mathbf{m}} \left(\mathcal{C} - \hbar T_{\mathbf{m}}^z - J \left(T_{\mathbf{m}}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{\mathbf{m}}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right) + J^z T_{\mathbf{m}}^z T_{m_x+1, m_y}^z \right. \\
&\quad \left. - J \left(T_{\mathbf{m}}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{\mathbf{m}}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) + J^z T_{\mathbf{m}}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right) P, \\
J &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}}, \\
J^z &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} - \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right), \\
\hbar &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}}, \\
\mathcal{C} &= \frac{3}{2}J - \frac{5}{2}h - \frac{(J_1 - J_3)^2}{32J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right).
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Деталі обчислень приведені в додатку Д.3.2.

Зробимо важливе зауваження. В границі $J/J_2 \rightarrow 0$ результат збігається з ефективним гамільтоніаном (3.21), отриманим в наближенні сильного зв'язку. Але результати у наближенні локалізованих магнонів містять більше аніж другий порядок у наближенні сильного зв'язку.

3.3. Результати точної діагоналізації для вихідної та ефективної моделей

Обговоримо область застосовності ефективних гамільтоніанів H_{eff} (наближення сильного зв'язку) і $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ (наближення локалізованих магнонів), які були отримані у двох попередніх параграфах цього розділу. Для того щоб з'ясувати як працюють ефективні гамільтоніани, проведемо точну діагоналізацію для трьох моделей з гамільтоніанами H , H_{eff} та $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ і порівняємо отримані результати для початкової моделі H та ефективних моделей (H_{eff} і $\mathcal{H}_{\text{eff}}$). При цьому ми розглядаємо криві намагніченості при низьких температурах та температурну залежність теплоємності в сильних магнітних полях.

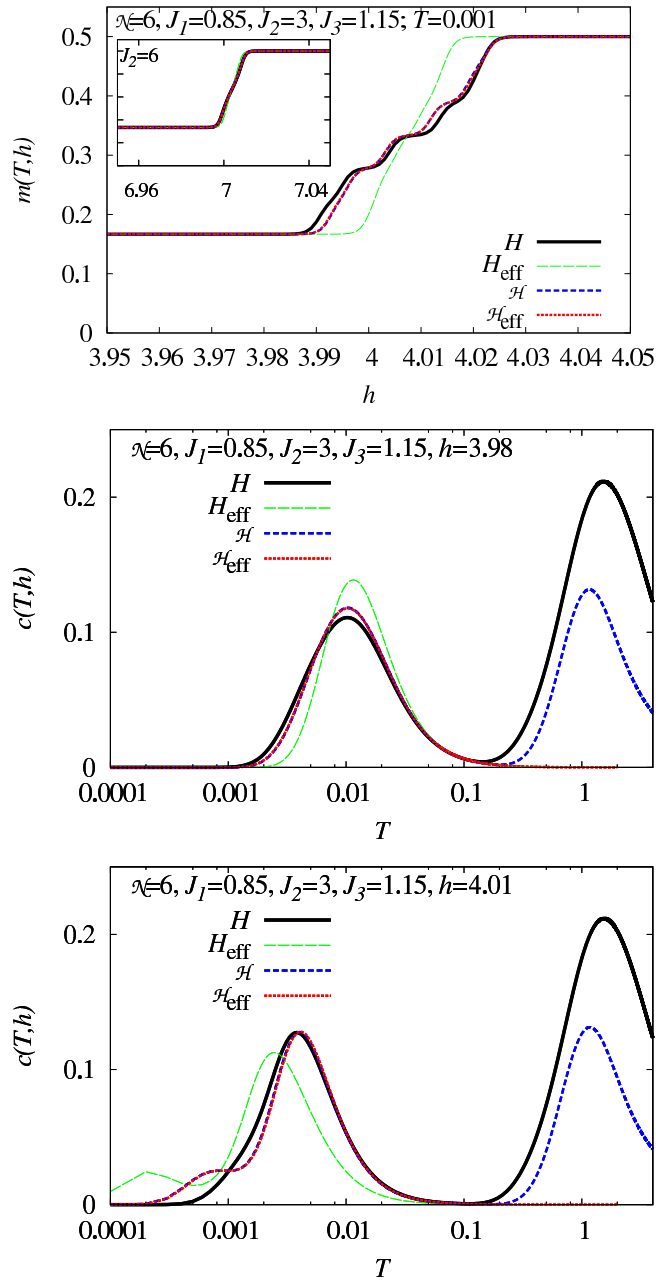


Рис. 3.3 Порівняння вихідної та ефективних моделей для деформованого ромбічного ланцюжка з $N = 18$ вузлів ($\mathcal{N} = 6$ комірок): криві намагніченості в залежності від магнітного поля та температурні залежності теплоємності для $J_1 = 0.85$, $J_2 = 3$ і $J_2 = 6$ (вставка), $J_3 = 1.15$.

Зокрема, на рис. 3.3, 3.4, 3.5 приведені низькотемпературні криві намагніченості для деформованих моделей з $\mathcal{N} = 6$ (ромбічний ланцюжок, рис. 3.3), $\mathcal{N} = 6$ (димер-плакетний ланцюжок, рис. 3.4) та $\mathcal{N} = 4$ і $\mathcal{N} = 8$ (гратка ква-

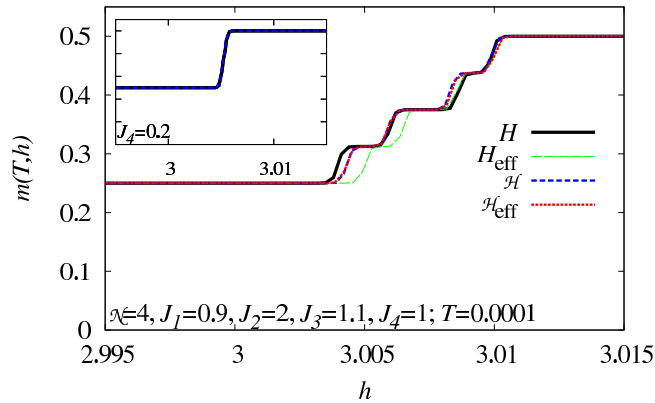


Рис. 3.4 Порівняння вихідної та ефективних моделей для димер-плакетного спінового ланцюжка з $N = 16$ вузлів ($\mathcal{N} = 4$ комірок): криві намагніченості в залежності від магнітного поля для $J_1 = 0.9$, $J_2 = 2$, $J_3 = 1.1$, $J_4 = 1$ і $J_4 = 0.2$ (вставка) при $T = 0.0001$.

дратне кагоме, рис. 3.5) комірок. Крім того, на рис. 3.3 та рис. 3.5 показані температурні залежності питомої теплоємності для деформованого ромбічного ланцюжка та ґратки квадратне кагоме в сильних магнітних полях. Результати точної діагоналізації для вихідних моделей (товста чорна лінія) порівнюються з даними точної діагоналізації для отриманих ефективних моделей: (i) наближення сильного зв'язку, гамільтоніан H_{eff} , див. рівняння (3.19), (3.20), (3.21), пунктирні зелені лінії; (ii) наближення локалізованих магнонів, гамільтоніан $\mathcal{H}$, див. рівняння (3.25), (3.32), (3.35), пунктирні сині криві; (iii) підхід локалізованих магнонів з використанням теорії збурень, гамільтоніан $\mathcal{H}_{\text{eff}}$, див. рівняння (3.30), (3.34), (3.36), пунктирні червоні криві.

Порівнюючи результати для вихідної моделі H з результатами для ефективних моделей, які описуються гамільтоніанами H_{eff} та $\mathcal{H}_{\text{eff}}$, бачимо їх добре узгодження. Варто відмітити, що відхилення від ідеальної геометрії $|J_1 - J_3|/J$ сягає аж 0.4, але навіть при таких великих відхиленнях узгодженість залишається задовільною.

Відзначимо, що відхилення від ідеальної геометрії, тобто коли $J_1 \neq J_3$, не приводить до помітної зміни ширини плато яке передую стрибку намагніченості

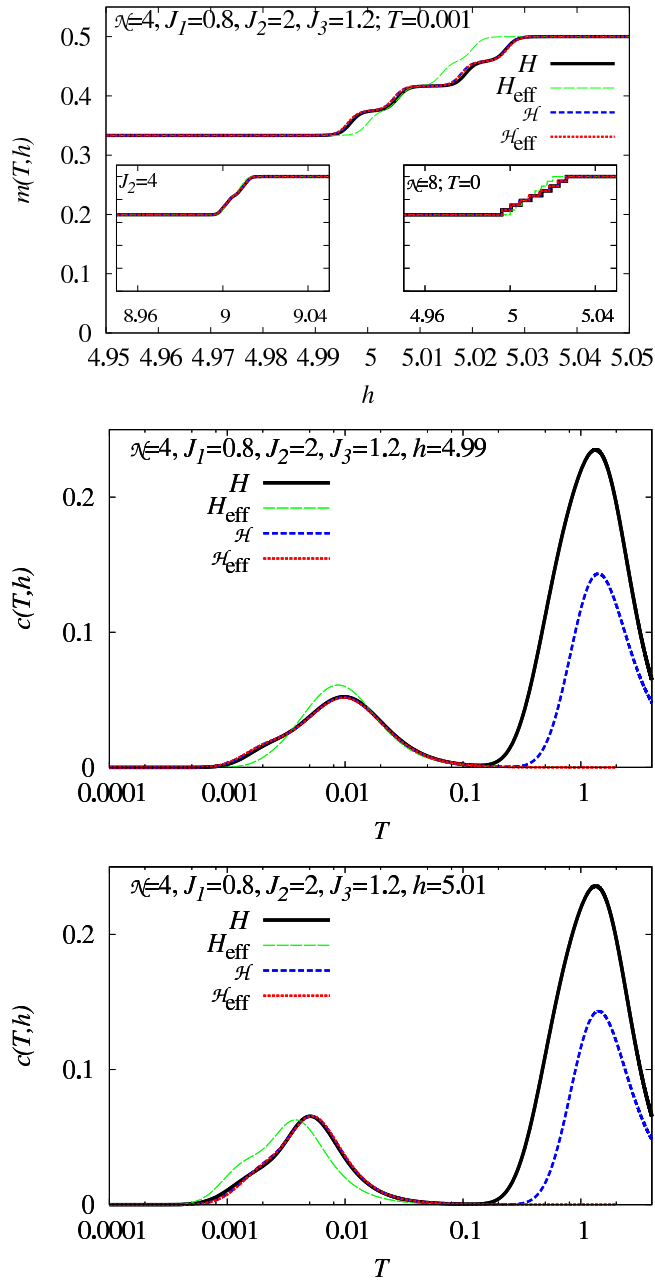


Рис. 3.5 Порівняння вихідної та ефективних моделей для ґратки квадратне кагоме з $N = 24$ вузлів ($\mathcal{N} = 4$ комірок) та $N = 48$ вузлів ($\mathcal{N} = 8$ комірок): криві намагніченості в залежності від магнітного поля та температурні залежності теплоємності для $J_1 = 0.8$, $J_2 = 2$ і $J_3 = 1.2$.

до значення насичення. Однак відхилення від ідеальної геометрії має значний вплив на сам стрибок намагніченості в околі h_1 . Є скінченна область $h_{1l} \leq h \leq h_{1h}$, де (замість вертикального стрибка) намагніченість стрімко зростає між

двома значеннями $m = \frac{1}{6}$ і $m = \frac{1}{2}$. Наближення сильного зв'язку передбачає межі цієї області h_{1l} і h_{1h} тільки якісно, і недооцінює ширину цієї області $h_{1h} - h_{1l}$, а підхід локалізованих магнонів дає значно кращі результати для h_{1l} і h_{1h} .

Варто також звернути увагу на температурну залежність теплоємності, яка має два чіткі максимуми (див. рис. 3.3, 3.5) у випадку сильних магнітних полів. Високотемпературний максимум — стандартний, а низькотемпературний — з'являється лише в сильних магнітних полях. Всі запропоновані ефективні гамільтоніани відтворюють перший низькотемпературний максимум теплоємності $c(T)$. Знову підхід локалізованих магнонів краще узгоджується з початковою моделлю. Гамільтоніани $\mathcal{H}$, H_{eff} і $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ можна вивчати методом точної діагоналізації (лише для малих систем) або методом квантового Монте Карло (застосовний для значно більшого числа комірок).

Отримані одновимірні ефективні моделі в наближенні сильного зв'язку чи в наближенні локалізованих магнонів можна описати аналітично навіть в термодинамічній границі, коли $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ [105–107]. У випадку наближення сильного зв'язку ефективна модель зводиться до невзаємодіючих ферміонів [105, 106]. На рис. 3.6 приведені результати ефективної теорії (наближення сильного зв'язку) для деформованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга (3.19) з параметрами $J_1 = 0.85$, $J_2 = 6$, $J_3 = 1.15$. На верхній панелі рис. 3.6 показано, що чіткий стрибок в кривій намагніченості при $T = 0$, який має місце у випадку ідеальної геометрії $J_1 = J_3$, переходить в гладку криву намагніченості спін- $\frac{1}{2}$ ізотропного XY ланцюжка в поперечному полі. Крім того, залишкова ентропія при полі насичення $s(T = 0, h = h_1) = \ln(2)/3 \approx 0.231$, яка присутня у випадку ідеальної геометрії $J_1 = J_3$, дорівнює нулю через наявність відхилення від ідеальної геометрії (середня панель на рис. 3.6). Поведінка питомої теплоємності, як показано на нижній панелі рис. 3.6, залежить від величини магнітного поля h .

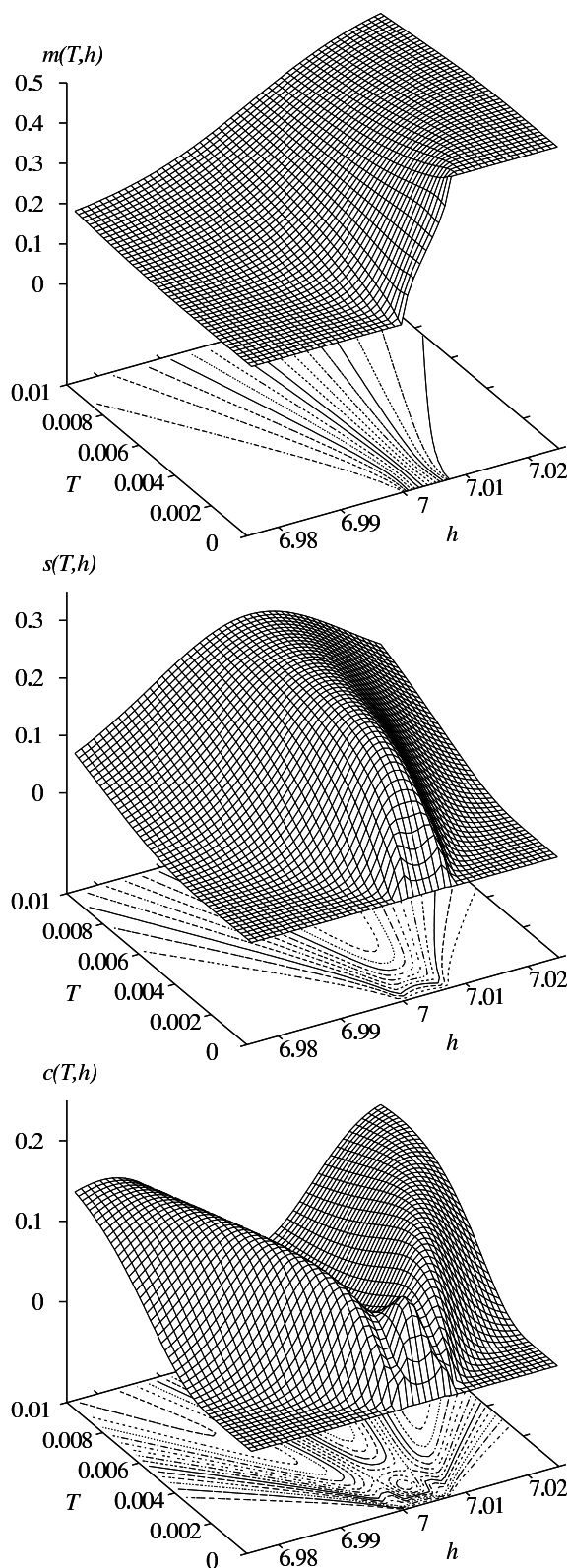


Рис. 3.6 Намагніченість $m(T, h)$, ентропія $s(T, h)$ та питома теплоємність $c(T, h)$ в розрахунку на один вузол для деформованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга з параметрами $J_1 = 0.85$, $J_2 = 6$, $J_3 = 1.15$. Ефективна модель у наближенні сильного зв'язку.

3.4. Застосування до азуриту

Застосуємо отримані ефективні моделі до пояснення деяких низькотемпературних властивостей природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. Магнітні властивості азуриту описуються моделлю деформованого ромбічного ланцюжка з набором параметрів $J_1 = 15.51\text{K}$, $J_2 = 33\text{K}$, $J_3 = 6.93\text{K}$ та $h = g\mu_B H$, $g = 2.06$, $\mu_B \approx 0.67171\text{K/T}$, див. [56] і [58]. Однак, слід зазначити, що мала обмінна взаємодія між $J_m = 4.62\text{K}$ між вузлами $m, 3$ і $m + 1, 3$ [див. рис. 3.1(а)] може мати значення. Знехтувавши обмінною взаємодією J_m , для констант ефективного гамільтоніана $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ з (3.30) та (3.31) отримаємо: $J = 0.845\text{K}$, $J^z = 0.287\text{K}$, ефективне магнітне поле є $h = (1.384H - 44.778)\text{K}$, де H є магнітне поле, яке прикладається експериментально і вимірюється в теслах.

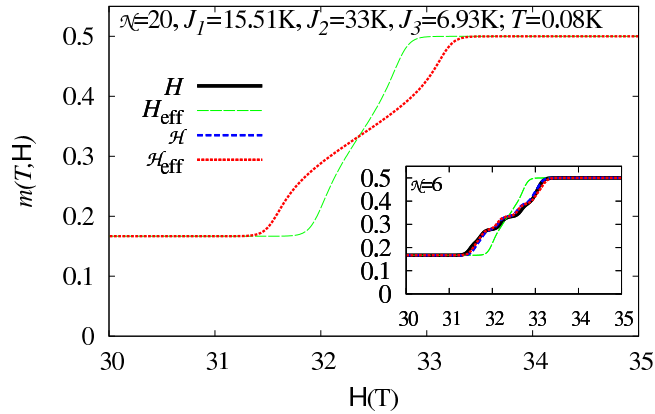


Рис. 3.7 Низькотемпературні ($T = 0.08\text{K}$) криві намагніченості деформованого ромбічного спінового ланцюжка з параметрами обмінної взаємодії для азуриту $J_1 = 15.51\text{K}$, $J_2 = 33\text{K}$, $J_3 = 6.93\text{K}$ та гіромагнітним відношенням $g = 2.06$. Вставка: $\mathcal{N} = 6$, тобто, $N = 18$; основна панель: $\mathcal{N} = 20$, тобто, $N = 60$.

На рис. 3.7, 3.8, 3.9 приведені результати точної діагоналізації для намагніченості, ентропії та питомої теплоємності моделі з параметрами азуриту. На вставці рис. 3.7 спочатку порівнюються результати різних підходів для $\mathcal{N} = 6$ комірок (тобто, $N = 18$ вузлів). Бачимо, що результати для H , $\mathcal{H}$, та $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ узгоджуються дуже добре, тоді як дані для наближення сильного зв'язку H_{eff}

помітно відхиляються від даних точної діагоналізації для вихідної моделі. Тому надалі ми зосередимо увагу на даних, які отримані з гамільтоніана $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ (3.30), (3.31) для $\mathcal{N} = 20$ комірок, тобто, $N = 60$ вузлів з параметрами $J = 0.845\text{K}$, $J^z = 0.287\text{K}$, та $h = (1.384H - 44.778)\text{K}$. На рис. 3.7 приведена крива намагніченості азуриту при температурі $T = 0.08\text{K}$, польові залежності питомої теплоємності c та ентропії s при температурах $T = 0.08\text{K}$ і $T = 0.4\text{K}$ показані на рис. 3.8, а на рис. 3.9 показані температурні залежності питомої теплоємності c та ентропії s для трьох значень магнітного поля $H = 31\text{T}$, 32.5T і 34T . Ефективна модель $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ дуже добре описує низькотемпературну область, тоді як високотемпературний максимум у c і відповідна ентропія $s \rightarrow \ln 2 \approx 0.693$ не описуються ефективним гамільтоніаном $\mathcal{H}_{\text{eff}}$.

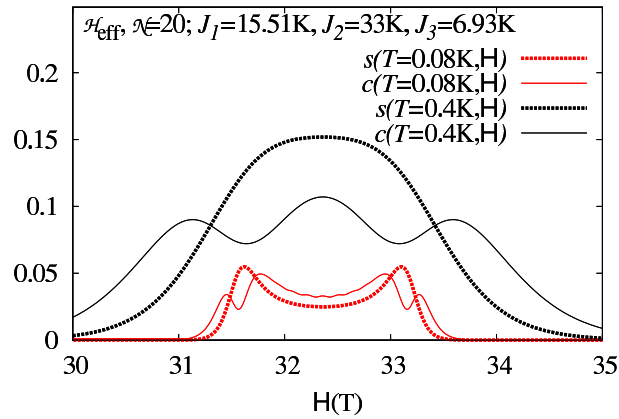


Рис. 3.8 Польова залежність ентропії (товсті лінії) та питомої теплоємності (тонкі лінії) деформованого ромбічного спінового ланцюжка з параметрами обмінної взаємодії для азуриту $J_1 = 15.51\text{K}$, $J_2 = 33\text{K}$, $J_3 = 6.93\text{K}$ та гіромагнітним відношенням $g = 2.06$ при низьких температурах, $T = 0.08\text{K}$ та $T = 0.4\text{K}$.

До яскраво виражених особливостей, які виникають внаслідок домінуючого вкладу локалізованих магнонів для термодинамічних властивостей у сильних магнітних полях та низьких температурах (нижче 1K) слід віднести: майже вертикальний стрибок в кривій намагніченості (див. рис. 3.7), збільшена низькотемпературна ентропія, що досягає значення $\ln(2)/3 \approx 0.231$ (рис. 3.9) і поява низькотемпературного максимуму в питомій теплоємності (рис. 3.9). Зміна ен-

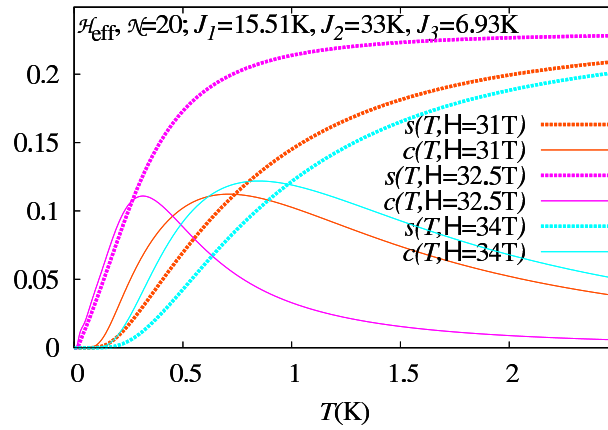


Рис. 3.9 Температурна залежність ентропії (товсті лінії) та питомої теплоємності (тонкі лінії) деформованого ромбічного спінового ланцюжка з параметрами обмінної взаємодії для азуриту $J_1 = 15.51\text{K}$, $J_2 = 33\text{K}$, $J_3 = 6.93\text{K}$ та гіромагнітним відношенням $g = 2.06$ в сильних магнітних полях, $H = 31\text{T}$, 32.5T , та 34T .

тропії, викликана зміною магнітного поля, призводить до магнітокалоричного ефекту (див. праці [9] та [56]). Крім того, останнім часом магнітокалоричний ефект в XXZ ланцюжках був розглянутий у [109]. Варто також згадати тут недавні експериментальні дослідження магнітокалоричного ефекту для інших фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга [110–112]. Було б цікаво провести експериментальні дослідження магнітокалоричного ефекту і для азуриту.

3.5. Гратка квадратне кагоме. Випадок загальнішої геометрії

Розглянемо випадок узагальненої геометрії (не такого типу, як у моделі азуриту, яка задається параметрами J_1 і J_3) для спин- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітної моделі Гайзенберга на двовимірній гратці квадратне кагоме. Будемо розглядати загальніше відхилення від ідеальної геометрії, вважаючи що обмінні взаємодії $J_{15}, \dots, J_{64}$ є різними, див. рис. 3.10. Як і раніше, ми припускаємо, що відхилення від ідеальної геометрії не є занадто велике, тобто може бути застосована теорія збурень. Використовуючи підхід локалізованих магнонів, побудуємо ефе-

ктивний опис ґратки квадратне кагоме з узагальненою геометрією.

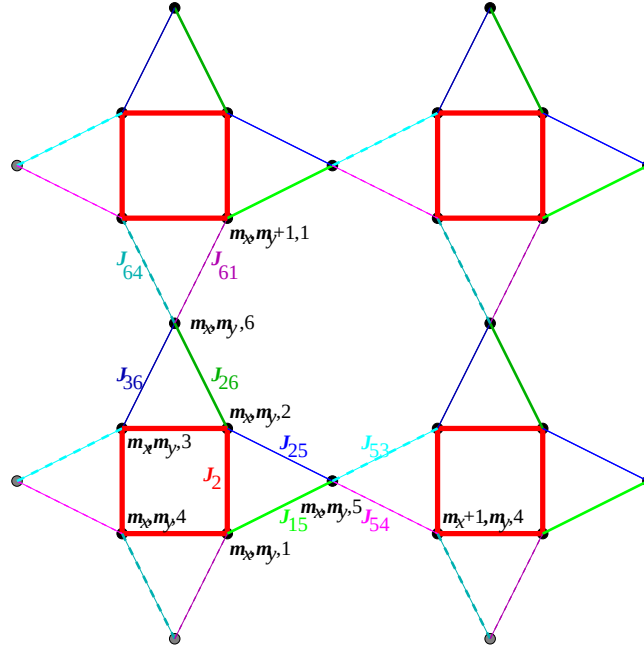


Рис. 3.10 Ґратка квадратне кагоме, яка описується гамільтоніаном (3.1). Пастками для локалізованих маґнонів є квадрати, позначені товстою червоною лінією (J_2 зв'язки). Для цієї геометрії маємо 9 параметрів: J_2 , J_{15} , J_{25} , J_{54} , J_{53} , J_{26} , J_{36} , J_{61} , J_{64} .

В сильних магнітних полях до уваги беруться наступні стани на кожному квадраті: повністю поляризований стан $|u\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\rangle$ з енергією $J_2 - 2h$ і одномаґнонний стан $|d\rangle = (|\uparrow_1\uparrow_2\uparrow_3\downarrow_4\rangle - |\uparrow_1\uparrow_2\downarrow_3\uparrow_4\rangle + |\uparrow_1\downarrow_2\uparrow_3\uparrow_4\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\uparrow_3\uparrow_4\rangle) / 2$ з енергією $-J_2 - h$. Далі,

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}H\mathcal{P},$$

$$\mathcal{P} = \otimes_{\mathbf{m}} \mathcal{P}_{\mathbf{m}}, \quad \mathcal{P}_{\mathbf{m}} = (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_{\mathbf{m}}. \quad (3.37)$$

Тут $\mathcal{P}_{\mathbf{m}}$ оператор проектування $\mathbf{m}$. Вводячи (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ оператори,

$$T^z = \frac{1}{2} (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|), T^+ = |u\rangle\langle d|, T^- = |d\rangle\langle u| \quad (3.38)$$

(див. (3.10)), можемо записати гамільтоніан $\mathcal{H}$ (3.37) наступним чином

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{\mathbf{m}} & \left[-\frac{3}{2}h - (h - 2J_2) T_{\mathbf{m}}^z - \left(h - \frac{3}{2}J_h \right) s_{\mathbf{m},5}^z - \left(h - \frac{3}{2}J_v \right) s_{\mathbf{m},6}^z \right. \\ & + \frac{J_{15} + J_{25}}{4} T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},5}^z + \frac{-J_{15} + J_{25}}{2} (T_{\mathbf{m}}^x s_{\mathbf{m},5}^x + T_{\mathbf{m}}^y s_{\mathbf{m},5}^y) \\ & + \frac{J_{54} + J_{53}}{4} s_{\mathbf{m},5}^z T_{m_x+1, m_y}^z + \frac{J_{54} - J_{53}}{2} \left(s_{\mathbf{m},5}^x T_{m_x+1, m_y}^x + s_{\mathbf{m},5}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right) \\ & + \frac{J_{26} + J_{36}}{4} T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},6}^z + \frac{J_{26} - J_{36}}{2} (T_{\mathbf{m}}^x s_{\mathbf{m},6}^x + T_{\mathbf{m}}^y s_{\mathbf{m},6}^y) \\ & \left. + \frac{J_{61} + J_{64}}{4} s_{\mathbf{m},6}^z T_{m_x, m_y+1}^z + \frac{-J_{61} + J_{64}}{2} \left(s_{\mathbf{m},6}^x T_{m_x, m_y+1}^x + s_{\mathbf{m},6}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right], \\ J_h = & \frac{J_{15} + J_{25} + J_{54} + J_{53}}{4}, J_v = \frac{J_{26} + J_{36} + J_{61} + J_{64}}{4}. \end{aligned} \quad (3.39)$$

Гамільтоніан $\mathcal{H}$ (3.39) відповідає спін- $\frac{1}{2}$ XXZ моделі на декорованій квадратній ґратці (ґратка Ліба) [105].

Отримана модель (3.39) є нефрустрована і тому її тепер можна досліджувати, скажімо, використовуючи метод квантового Монте Карло. Однак, її можна і далі спростити, виключивши спінові змінні $\mathbf{s}_{\mathbf{m},5}$ та $\mathbf{s}_{\mathbf{m},6}$, які належать до вузлів, що з'єднують сусідні квадрати. Для цього розіб'ємо гамільтоніан $\mathcal{H}$, приведений в рівнянні (3.39), на “головну” частину $\mathcal{H}_{\text{main}}$

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{main}} = \sum_{\mathbf{m}} & \left[-\frac{3}{2}h_1 - (h_1 - 2J_2) T_{\mathbf{m}}^z - \left(h_1 - \frac{3}{2}J \right) (s_{\mathbf{m},5}^z + s_{\mathbf{m},6}^z) \right. \\ & \left. + \frac{J}{2} \left(T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},5}^z + s_{\mathbf{m},5}^z T_{m_x+1, m_y}^z + T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},6}^z + s_{\mathbf{m},6}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right) \right] \end{aligned} \quad (3.40)$$

[тобто гамільтоніан $\mathcal{H}$ для випадку ідеальної геометрії $J_{15} = \dots = J_{64} = J =$

$(J_{15} + \dots + J_{64})/8$ при $h = h_1 = 2J_2 + J$ і на “збурення” $\mathcal{V}$

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = \sum_{\mathbf{m}} \left\{ -\frac{3}{2}(h - h_1) - (h - h_1) T_{\mathbf{m}}^z - \left[h - h_1 - \frac{3}{2}(J_h - J) \right] s_{\mathbf{m},5}^z \right. \\ \left. - \left[h - h_1 - \frac{3}{2}(J_v - J) \right] s_{\mathbf{m},6}^z + \frac{J_{15} + J_{25} - 2J}{4} T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},5}^z \right. \\ \left. + \frac{-J_{15} + J_{25}}{2} (T_{\mathbf{m}}^x s_{\mathbf{m},5}^x + T_{\mathbf{m}}^y s_{\mathbf{m},5}^y) + \frac{J_{54} + J_{53} - 2J}{4} s_{\mathbf{m},5}^z T_{m_x+1, m_y}^z \right. \\ \left. + \frac{J_{54} - J_{53}}{2} (s_{\mathbf{m},5}^x T_{m_x+1, m_y}^x + s_{\mathbf{m},5}^y T_{m_x+1, m_y}^y) + \frac{J_{26} + J_{36} - 2J}{4} T_{\mathbf{m}}^z s_{\mathbf{m},6}^z \right. \\ \left. + \frac{J_{26} - J_{36}}{2} (T_{\mathbf{m}}^x s_{\mathbf{m},6}^x + T_{\mathbf{m}}^y s_{\mathbf{m},6}^y) + \frac{J_{61} + J_{64} - 2J}{4} s_{\mathbf{m},6}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right. \\ \left. + \frac{-J_{61} + J_{64}}{2} (s_{\mathbf{m},6}^x T_{m_x, m_y+1}^x + s_{\mathbf{m},6}^y T_{m_x, m_y+1}^y) \right\} \quad (3.41) \end{aligned}$$

(тобто $\mathcal{V} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_{\text{main}}$). Основний стан $|\varphi_0\rangle$ гамільтоніана $\mathcal{H}_{\text{main}}$ (тоді $s_{\mathbf{m},5}^z = s_{\mathbf{m},6}^z = 1/2$) має енергію $\varepsilon_0 = -(5J_2 + J)\mathcal{N}$, є $2^{\mathcal{N}}$ -кратно виродженим і формує модельний простір, який визначається проектором $P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$:

$$P = \otimes_{\mathbf{m}} P_{\mathbf{m}}, \quad P_{\mathbf{m}} = \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \otimes (|\uparrow_5\rangle\langle\uparrow_5| \otimes |\uparrow_6\rangle\langle\uparrow_6|)_{\mathbf{m}}. \quad (3.42)$$

Для $J_{15} - J \neq 0, \dots, J_{64} - J \neq 0$, і $h - h_1 \neq 0$ будуємо ефективний гамільтоніан $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ який діє лише в модельному просторі, але дає точну енергію основного стану. $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ знаходимо з формули типу (3.6)

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = P\mathcal{H}P + P\mathcal{V} \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha}\rangle\langle\varphi_{\alpha}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha}} \mathcal{V}P + \dots \quad (3.43)$$

Тут $|\varphi_{\alpha}\rangle$ ($\alpha \neq 0$) є збуджені стани гамільтоніана $\mathcal{H}_{\text{main}}$. Набір збуджених станів, які входять в другий доданок (3.43) складатимуться з станів з перевернутим спіном на вузлах, що з'єднують два сусідні квадрати. Енергія цих збуджених станів залежить від станів на цих двох квадратах. Точніше, енергія збудженого стану набуває значення $\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_0 + 2J_2 - J$, якщо обидва квадрати є в стані $|u\rangle$, значення $\varepsilon_{\alpha} = \varepsilon_0 + 2J_2 - J/2$, якщо один з квадратів є в стані $|u\rangle$, а другий в стані $|d\rangle$, і

значення $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + 2J_2$, якщо обидва квадрати є в стані $|d\rangle$. Беручи це до уваги, ми можемо обчислити другий доданок рівняння (3.43) і після використання (псевдо)спінових операторів (3.37), отримаємо

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{(mn)} [\mathbf{J}_{mn} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) + J_{mn}^z T_m^z T_n^z] - \mathbf{h} \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z + \mathcal{N}\mathbf{C}. \quad (3.44)$$

Параметри $\mathbf{J}_{mn}$, J_{mn}^z , $\mathbf{h}$, і $\mathbf{C}$ мають вигляд:

$$\begin{aligned} J_h &= -\frac{(-J_{15} + J_{25})(J_{54} - J_{53})}{16J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}}, \\ J_v &= -\frac{(J_{26} - J_{36})(-J_{61} + J_{64})}{16J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}}, \\ J_h^z &= \frac{S_h}{16J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} - \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right), J_v^z = \frac{S_v}{16J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} - \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right), \\ \mathbf{h} &= h - h_1 - \frac{S_h + S_v}{16J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}}, h_1 = 2J_2 + J, \\ \mathbf{C} &= -\frac{5}{2}h + \frac{3}{2}J - \frac{S_h + S_v}{64J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right), \\ J &= \frac{J_{15} + J_{25} + J_{54} + J_{53} + J_{26} + J_{36} + J_{61} + J_{64}}{8}, \\ S_h &= \frac{(-J_{15} + J_{25})^2 + (J_{54} - J_{53})^2}{2}, S_v = \frac{(J_{26} - J_{36})^2 + (-J_{61} + J_{64})^2}{2}. \end{aligned} \quad (3.45)$$

Тут індекс h (v) позначає горизонтальний (вертикальний) напрямок. У випадку $J_{25} = J_{54} = J_{36} = J_{61} = J_1$ і $J_{15} = J_{53} = J_{26} = J_{64} = J_3$ рівняння (3.44) і (3.45) зводяться до рівняння (3.36).

В границі $J/J_2 \rightarrow 0$ рівняння (3.44) і (3.45) зводяться до ефективного гамільтоніана H_{eff} в наближенні сильного зв'язку

$$\begin{aligned} J_h &= -\frac{(-J_{15} + J_{25})(J_{54} - J_{53})}{16J_2}, J_v = -\frac{(J_{26} - J_{36})(-J_{61} + J_{64})}{16J_2}, \\ J_h^z &= J_v^z = 0, \mathbf{h} = h - h_1 - \frac{S_h + S_v}{16J_2}, \mathbf{C} = -\frac{5}{2}h + \frac{3}{2}J - \frac{S_h + S_v}{32J_2}. \end{aligned} \quad (3.46)$$

У додатку Д.4 подібна геометрія розглянута і для ромбічного ланцюжка (узга-
льнений фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок).

3.6. Фазовий перехід Березінського-Костерліца-Таулеса

Ефективні гамільтоніани для деформованої ґратки квадратне кагоме є ві-
домі спин- $\frac{1}{2}$ моделі на квадратній ґратці: ізотропна XU модель на квадратній
ґратці (3.21), XXZ модель на декорованій квадратній ґратці (3.35) та XXZ
модель на квадратній ґратці (3.36). Всі моделі містять доданок Зеємана, що
описує взаємодію з магнітним полем, яке спрямоване вздовж осі z . Перша і
третя моделі інтенсивно досліджувались раніше, див. [113–125].

Найбільш інтригуюча властивість отриманих ефективних моделей – існу-
вання фазового переходу Березінського-Костерліца-Таулеса (БКТ) [128, 129].
У класичній двовимірній ізотропній XU моделі відбувається перехід від зв’я-
заних пар вихор-антивихор при низьких температурах до неспарених вихорів
і антивихорів при критичній температурі T_c . Для $T < T_c$ (надплинна фаза)
система характеризується квазідалеким порядком, а з підвищенням темпера-
тури середньоквадратична відстань в парі збільшується і при деякій критичній
температурі БКТ-переходу T_c відбувається дисоціація пар з утворенням роз-
рідженого газу квазівільних вихорів. Для $T > T_c$ (нормальна фаза) система
є неупорядкована з експоненційно зростаючою кореляційною довжиною ξ при
 $T \rightarrow T_c$,

$$\xi \propto e^{\frac{b}{\sqrt{\tau}}}, \quad \tau = \frac{T - T_c}{T_c}. \quad (3.47)$$

Температура переходу Березінського-Костерліца-Таулеса для класичної ізо-
тропної XU моделі на квадратній ґратці (без поля) є $T_c \approx 0.893|J|$ [130, 131].
Фазовий перехід Березінського-Костерліца-Таулеса відбувається і у квантовому
випадку коли $s = 1/2$, однак при нижчій температурі $T_c \approx 0.343|J|$ [115–117,
120, 121].

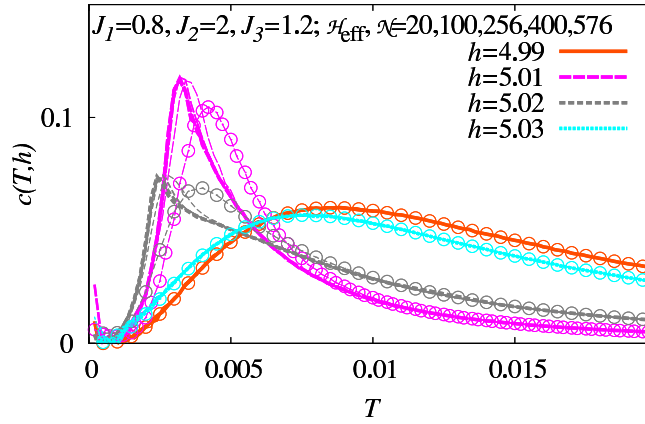


Рис. 3.11 Питома теплоємність $c(T, h)$ при високих магнітних полях ($h = 4.99, 5.01, 5.02, 5.03$) та низьких температурах для моделі Гайзенберга на деформованій квадратній ґратці з параметрами $J_1 = 0.8$, $J_2 = 2$, $J_3 = 1.2$, отримана методом квантового Монте Карло для ефективних гамільтоніанів $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ (3.44) і (3.45) з $\mathcal{N} = 100, 256, 400, 576$. Тоненькі криві з колами позначають результати точної діагоналізації для $\mathcal{N} = 20$.

Можна збудувати фазову діаграму для антиферромагнітної моделі Гайзенберга на деформованій ґратці квадратне кагоме в $h - T$ площині. Максимум питомої теплоємності у температурній залежності використовується як індикатор БКТ-переходу: відомо [113, 114], що БКТ-перехід стається при дещо нижчій температурі аніж та, при якій теплоємність має максимум. На рисунку 3.11 приведені питомі теплоємності при високих магнітних полях ($h = 4.99, 5.01, 5.02, 5.03$) та низьких температурах для моделі Гайзенберга на деформованій квадратній ґратці, а на рис. 3.12 приведена фазова діаграма антиферромагнітної моделі Гайзенберга на деформованій ґратці квадратне кагоме. Товста суцільна синя лінія позначає положення T^* максимуму питомої теплоємності $c(T, h)$ отриманої методом точної діагоналізації для $\mathcal{N} = 20$ [18]. Символи позначають дані квантового Монте Карло ($\mathcal{N} = 100, 256, 400, 576$) для $T^*(h)$. На рис. 3.12(b) показано висоту максимуму питомої теплоємності тобто величину $c(T^*, h)$. Знову порівнюємо результати точної діагоналізації для $\mathcal{N} = 20$ (тонка червона лінія) з даними квантового Монте Карло для $\mathcal{N} = 100, 256, 400$, і 576 (символи). Оче-

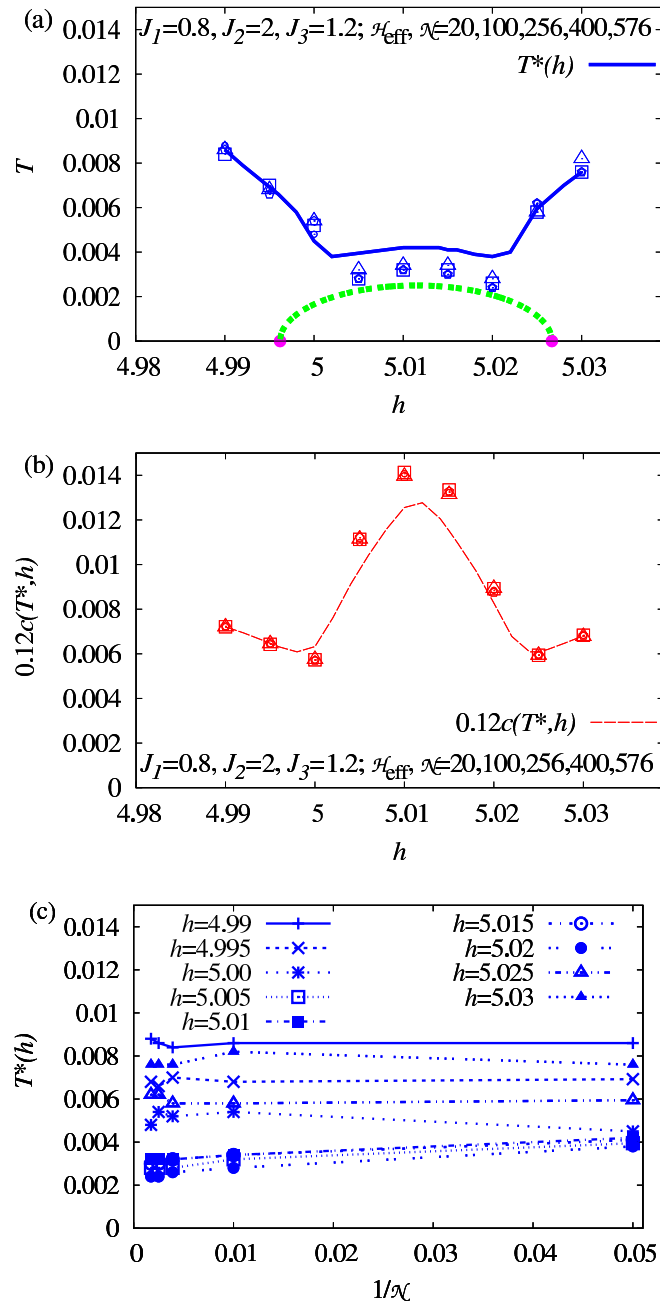


Рис. 3.12 (а) Фазової діаграма $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітної моделі Гайзенберга на деформованій ґратці квадратне кагоме ($J_1 = 0.8, J_2 = 2, J_3 = 1.2$) в сильних магнітних полях (товста пунктирна зелена крива), визначена положенням максимумами T^* питомої теплоємності $c(T, h)$ і зображена товстою синьою кривою ($\mathcal{N} = 20$) і синіми символами (трикутники – $\mathcal{N} = 100$, квадрати – $\mathcal{N} = 256$, п'ятикутники – $\mathcal{N} = 400$, кружечки – $\mathcal{N} = 576$). (б) Висота максимуму питомої теплоємності $c(T^*, h)$ (помножено на 0.12): пунктирна червона лінія – $\mathcal{N} = 20$, червоні трикутники – $\mathcal{N} = 100$, квадрати – $\mathcal{N} = 256$, п'ятикутники – $\mathcal{N} = 400$, кружечки – $\mathcal{N} = 576$. (с) залежність T^* від $1/\mathcal{N}$ для різних значень магнітного поля h .

видно, що висота максимуму помітно зростає із ростом $\mathcal{N}$ в області поля, де з'являється перехід БКТ.

Таким чином, квантовий спіновий антиферромагнетик Гайзенберга на ґратці квадратне кагоме з параметрами поблизу значень, що відповідають бездисперсійній одномагнетонній зоні має виявляти фізику явища Березінського-Костерліца-Таулеса. Цей перехід стається у квантовому антиферромагнетикі квадратне кагоме з майже ідеальною геометрією при низьких температурах і полях поблизу поля насичення.

3.7. Висновки

Запропоновано три типи ефективних моделей (H_{eff} , $\mathcal{H}$ і $\mathcal{H}_{\text{eff}}$) для опису фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга, які допускають існування локалізованих магнонів в сильних магнітних полях при низьких температурах. Всі ефективні моделі відносяться до зменшеного гільбертового простору (тільки два стани кожної комірки-пастки беруться до уваги). Наближення сильного зв'язку (H_{eff}) передбачає, що відношення J/J_2 є малим, а підхід локалізованих магнонів вимагає, щоб було малим лише відхилення від ідеальної геометрії $|J_1 - J_3|/J$. Порівняння даних точної діагоналізації для H , H_{eff} і $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ ілюструє застосовність запропонованих моделей. Проста і добре вивчена спін- $\frac{1}{2}$ XXZ модель забезпечує точний низькотемпературний опис вихідної фрустрованої спін- $\frac{1}{2}$ моделі Гайзенберга на деформованому ромбічному і димер-плакетному ланцюжках чи деформованій ґратці квадратне кагоме в сильних магнітних полях. Якщо $J/J_2 \ll 1$, то придатною стає ще простіша одновимірна спін- $\frac{1}{2}$ ізотропна XU модель. Отримані ефективні квантові моделі є добре відомі у статистичній фізиці. Вони не мають фрустрації (конкуренції взаємодій) і дозволяють пряме застосування таких методів, як ферміонізація Йордана-Вігнера, підстановка Бете, метод ренормалізаційної групи для матриці густини чи метод квантового Монте Карло. Запропоновані ефективні моделі дозволяють дати теоретичні пе-

редбачення для низькотемпературних властивостей азуриту в сильних магнітних полях (понад 30 Т).

Детально розглянута $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітна модель Гайзенберга на двовимірній ґратці квадратне кагоме. Побудовано ефективні низькоенергетичні гамільтоніани у випадку загальної геометрії (а не такої як в моделі азуриту). Отримано фазову діаграму, яка описує поведінку $s = \frac{1}{2}$ ґратки квадратне кагоме в сильному магнітному полі при низьких температурах. Фазова діаграма містить лінію фазових переходів Березінського-Костерліца-Таулеса.

РОЗДІЛ 4

АНІЗОТРОПІЯ ОБМІННИХ ВЗАЄМОДІЙ ГАЙЗЕНБЕРГА ТА ДОВІЛЬНО ОРІЄНТОВАНЕ ЗОВНІШНЄ МАГНІТНЕ ПОЛЕ

Розгляд у розділі 3 стосувався випадку ізотропної взаємодії Гайзенберга. Але це не обов'язково має ставатися у реальних сполуках. Наприклад, азурит $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ чи магнітна сполука $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ мають залежність кривої намагніченості від напрямку прикладеного зовнішнього магнітного поля. Тому видається корисним дослідити прояви ефектів локалізованих магнонів, врахувавши анізотропію обмінних взаємодій Гайзенберга.

4.1. Ефективний опис фрустрованого ромбічного XXZ ланцюжка Гайзенберга у довіЛЬНО орієнтованому зовнішньому магнітному полі. Випадок $\mathbf{h} = (0, 0, h)$

Розгляньмо спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітну модель з анізотропною взаємодією Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку (рис. 4.1). Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) - h \sum_{i=1}^N s_i^z, \quad \alpha = x, z, \quad (4.1)$$

де перша сума береться за всіма сусідніми вузлами ґратки, тоді як друга сума пробігає всі N вузлів ґратки, див. рис. 4.1. Крім того, $J_{ij} > 0$ та $\Delta \neq 1$. Якщо $J_2 > 0$ є найбільшою антиферромагнітною обмінною взаємодією, то можна очікувати, що у сильному магнітному полі лише два стани на вертикальному J_2 -зв'язку відіграватимуть роль у низькотемпературних властивостях. Це дає можливість ефективно описати вихідну фрустровану квантову спінову систему

з допомогою простішої двостанової моделі. Практично збудувати такі ефективні теорії можна, використовуючи наближення сильного зв'язку.

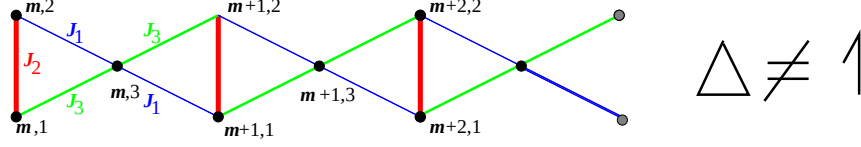


Рис. 4.1 Фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок. Як і раніше нумеруємо вузли ґратки парю індексів, де перший індекс нумерує комірки ґратки $m = 1, \dots, \mathcal{N}$, $\mathcal{N} = N/3$, N — число вузлів у ґратці, а другий — позначає положення вузла в комірці.

Розглядатимемо два випадки орієнтації зовнішнього магнітного поля: 1) зовнішнє магнітне поле спрямоване вздовж осі z і 2) зовнішнє магнітне поле спрямоване вздовж осі x . У першому випадку виходитимемо з гамільтоніана (4.1) з $\alpha = z$. Для випадку, коли магнітне поле прикладене вздовж осі x , зробимо унітарне перетворення вихідного гамільтоніана (4.1), яке еквівалентне повороту системи координат навколо осі y на кут $\frac{\pi}{2}$, і прийдемо до гамільтоніана з анізотропною взаємодією в магнітному полі, спрямованому вздовж осі z :

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} [\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + (\Delta - 1) s_i^x s_j^x] - h \sum_i s_i^z. \quad (4.2)$$

Наближення сильного зв'язку базується на припущенні, що взаємодія J_2 є домінуючою, тобто $\frac{J_i}{J_2} \ll 1$, $i \neq 2$. Тому гамільтоніан H розбиваємо на “основну частину” H_{main} (гамільтоніан, який описує взаємодію двох спінів на вертикальному зв'язку з константою J_2 і взаємодію Зеемана всіх спінів з магнітним полем h_0 , див. нижче) і на “збурення” V , $H = H_{\text{main}} + V$. В сильних магнітних полях тільки два з чотирьох станів на вертикальному зв'язку беруться до уваги, а саме, $|u\rangle$ і $|d\rangle$ з енергіями ε_u та ε_d відповідно. Далі $\varepsilon_u = \varepsilon_d$ при $h = h_0$. Основний стан $|\varphi_0\rangle$ гамільтоніана H_{main} є $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений; тут $\mathcal{N} = N/3$ є число комірок у ланцюжку. Введемо оператор проектування P на модельний простір,

утворений $2^{\mathcal{N}}$ -кратно виродженим основним станом:

$$P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| = \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} [(|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|) \otimes |\uparrow_3\rangle\langle\uparrow_3|]_m. \quad (4.3)$$

Для $J_i \neq 0$, $i \neq 2$ і $h - h_0 \neq 0$ будемо ефективний гамільтоніан, виходячи з рівняння (3.6).

Для початку розглянемо випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі z . В сильних магнітних полях ми маємо справу з наступними двома станами на вертикальному зв'язку: повністю поляризованим станом $|u\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle$ і одномагнетонним станом $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)$ з енергіями $\varepsilon_u = \Delta\frac{J_2}{4} - h$ та $\varepsilon_d = -\frac{J_2}{2} - \frac{\Delta J_2}{4}$, відповідно. Ефективний гамільтоніан зручно записати, використовуючи (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ оператори T (3.17). Перший доданок у правій стороні рівняння (3.6) на мові (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ операторів має вигляд:

$$PHP = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[-\frac{J_2}{4} - h + \Delta\frac{J}{2} - (h - h_1)T_m^z \right], \quad (4.4)$$

де $h_1 = h_0 + \Delta J$, $h_0 = J_2\sqrt{(1+\Delta)/2}$, а $J = (J_1 + J_3)/2$. Для знаходження другого доданку у правій стороні формули (3.6) розглядаємо $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}}$ збуджених станів $|\varphi_\alpha\rangle$ — це стани з одним перевернутим спіном на вузлі, який з'єднує дві сусідні комірки (див. рис. 4.1), з енергією $\varepsilon_\alpha = \varepsilon_0 + h_0$. Маємо

$$PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP = -\frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2(\Delta + 1)} \sum_m [1 - 2T_m^z - 2(T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)] \quad (4.5)$$

Тому для ефективного гамільтоніана H_{eff} (3.6) в наближенні сильного зв'язку отримаємо наступний вираз:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \sum_m [\mathcal{C} - \mathbf{h}T_m^z + \mathbf{J}(T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)], \\ \mathcal{C} &= -h - \frac{J_2}{4} + \Delta\frac{J}{2} - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4(1+\Delta)J_2}, \quad J = \frac{J_3 + J_1}{2}, \\ \mathbf{h} &= h - h_1 - \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1+\Delta)J_2}, \quad h_1 = \frac{1+\Delta}{2}J_2 + \Delta J, \\ \mathbf{J} &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1+\Delta)J_2}. \end{aligned} \quad (4.6)$$

В границі ізотропної взаємодії Гайзенберга $\Delta = 1$ отриманий ефективний гамільтоніан збігається з (3.19) у розділі 3. Крім того, у границі $\Delta \rightarrow \infty$, але $J_i \Delta = I_i < \infty$, отримаємо: $C \rightarrow -h + \frac{1}{4}(I_1 + I_3)$, $h \rightarrow h - \frac{1}{2}(I_1 + I_2 + I_3)$, $J \propto \frac{1}{\Delta^2} \rightarrow 0$. Таким чином у цій границі ефективна модель зводиться до моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі.

4.2. Випадок $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$

Розглянемо далі випадок, коли магнітне поле прикладене вздовж осі x . Виходитимемо з гамільтоніана (4.2). У сильному магнітному полі маємо справу з двома станами $|u\rangle$ та $|d\rangle$ на кожному вертикальному зв'язку:

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle + \beta |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle, \text{ та } |d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle), \quad (4.7)$$

де константи α і β мають наступний вигляд в залежності від значення параметра анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга:

для $\Delta < 1$

$$\alpha = \frac{1}{C} \left[h + \sqrt{\frac{(1-\Delta)^2}{16} J_2^2 + h^2} \right], \quad \beta = \frac{1}{C} \frac{1-\Delta}{4} J_2;$$

для $\Delta > 1$

$$\alpha = \frac{1}{C} \frac{\Delta-1}{4} J_2, \quad \beta = \frac{1}{C} \left[h - \sqrt{\frac{(\Delta-1)^2}{16} J_2^2 + h^2} \right]. \text{ Енергія стану } |u\rangle \text{ є } \varepsilon_u = J_2/4 - \sqrt{J_2^2(\Delta-1)^2 + 16h^2}/4, \text{ а стану } |d\rangle - \varepsilon_d = -J_2/4 - J_2(\Delta+1)/4 \text{ і не залежать від значення } \Delta.$$

Для першого доданку в правій стороні формули (3.6) отримаємо:

$$PHP = \sum_m \left[-\frac{h}{2} - \frac{2+\Delta}{4} J_2 - (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) \left(\frac{1}{2} + T_m^z \right) \right], \quad (4.8)$$

де $J = (J_1 + J_3)/2$, $h_0 = J_2 \sqrt{(1+\Delta)/2}$. Існує два класи збуджених станів, які дають ненульовий внесок у другий доданок у правій стороні рівняння (3.6). Перший з них складається з $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}}$ станів, які містять один перевернутий спін

на третьому вузлі, що з'єднує дві сусідні комірки, див. рис. 4.1. Тому

$$\begin{aligned}
 PV \sum_{\alpha_1 \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha_1}\rangle \langle \varphi_{\alpha_1}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha_1}} VP \sum_m (\mathcal{C}_1 - \mathbf{h}_1 T_m^z + \mathbf{J}^x T_m^x T_{m+1}^x + \mathbf{J}^y T_m^y T_{m+1}^y), \\
 \mathcal{C}_1 = -\frac{(J_3 - J_1)^2}{16h_0} [1 + 2\alpha\beta(1 - \Delta^2) + \Delta^2], \\
 \mathbf{h}_1 = -\frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta, \\
 \mathbf{J}^x = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \\
 \mathbf{J}^y = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2. \tag{4.9}
 \end{aligned}$$

Другий клас збуджених станів складається з $\mathcal{N}2^{\mathcal{N}-1}$ станів. Стан димера комірки m в цьому випадку визначається як $-\beta|\uparrow_1\uparrow_2\rangle + \alpha|\downarrow_1\downarrow_2\rangle$ з енергією $\frac{1}{4}[J_2 + \sqrt{(\Delta - 1)^2 J_2^2 + 16h^2}]$. Енергія цих збуджених станів є $\varepsilon_{\alpha_2} = \varepsilon_0 + \frac{1}{2}(3 + \Delta)J_2$. Легко переконатися, що

$$PV \sum_{\alpha_2 \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha_2}\rangle \langle \varphi_{\alpha_2}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha_2}} VP = - \sum_m \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2 \left(\frac{1}{2} + T_m^z \right). \tag{4.10}$$

Об'єднуючи формули (4.9), (4.10), (4.11), знаходимо H_{eff} . Ефективний гамільтоніан для фрустрованого ромбічного спінового XXZ ланцюжка Гайзенберга ($\Delta \geq 1$) в магнітному полі, прикладеному вздовж осі x , має вигляд:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{eff}} &= \sum_m (\mathcal{C} - \mathbf{h} T_m^z + \mathbf{J}^x T_m^x T_{m+1}^x + \mathbf{J}^y T_m^y T_{m+1}^y), \\
 \mathcal{C} &= -\frac{h}{2} - \frac{2 + \Delta}{4} J_2 - \frac{1}{2} (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) \\
 &\quad - \frac{(J_3 - J_1)^2}{16h_0} [1 + 2\alpha\beta(1 - \Delta^2) + \Delta^2] - \frac{4(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2, \\
 \mathbf{h} &= (h - h_0 - J) (\alpha^2 - \beta^2) - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta + \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2, \\
 \mathbf{J}^x &= \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \mathbf{J}^y = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2. \tag{4.11}
 \end{aligned}$$

В границі $\Delta \rightarrow 1$ отримані ефективні гамільтоніани (4.6) і (4.11) збігаються і відповідають (нефрустрованому) спін- $\frac{1}{2}$ ізотропному XY ланцюжку в поперечному магнітному полі. Для ідеального фрустрованого ромбічного ланцюжка ($J_1 = J_3$) у границі $\Delta \rightarrow \infty$, але $J_i \Delta = I_i < \infty$, ефективний гамільтоніан (4.11) зводиться до моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі: $J^x = 0$, $J^y = 0$.

4.3. Порівняння вихідних та ефективних моделей

Для дослідження отриманих ефективних моделей (4.6) і (4.11) порівняймо їх передбачення з даними для вихідних моделей. Для прикладу розглядатимемо низькотемпературні криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі x та вздовж осі z , див. рис.4.2, рис.4.3, рис.4.4. Такі криві отримаємо методом точної діагоналізації. При точній діагоналізації братимемо ланцюжок з $N = 12$ і $N = 15$ вузлів з періодичними граничними умовами і з параметрами $J_1 = J_3 = 1$ (ідеальна геометрія), $J_1 = 0.85$, $J_3 = 1.15$ (неідеальна геометрія), $J_2 = 3, 6$, $\Delta < 1$, $\Delta > 1$ при низькій температурі $T = 0.001$.

Очевидно, що коли параметр анізотропії взаємодії Гайзенберга $\Delta = 1$, то криві намагніченості ромбічного ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі x та вздовж осі z , збігаються. Однак, коли Δ відрізняється від одиниці, зокрема, коли $\Delta = 1.5$ чи $\Delta = 3$, то криві намагніченості ромбічного ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі x та вздовж осі z , відрізняються. У випадку ідеальної геометрії (див. рис. 4.2) крива намагніченості має вертикальний стрибок при характеристичному магнітному полі h_* . Коли магнітне поле прикладене вздовж осі z , то при цьому характеристичному полі намагніченість досягає значення насичення, тобто, $m(h_* + 0) = \frac{1}{2}$. У магнітному полі, прикладеному вздовж осі x , значення насичення намагніченості досягається лише в границі $h \rightarrow \infty$, але при $h = h_* + 0$ значення намагніченості близьке

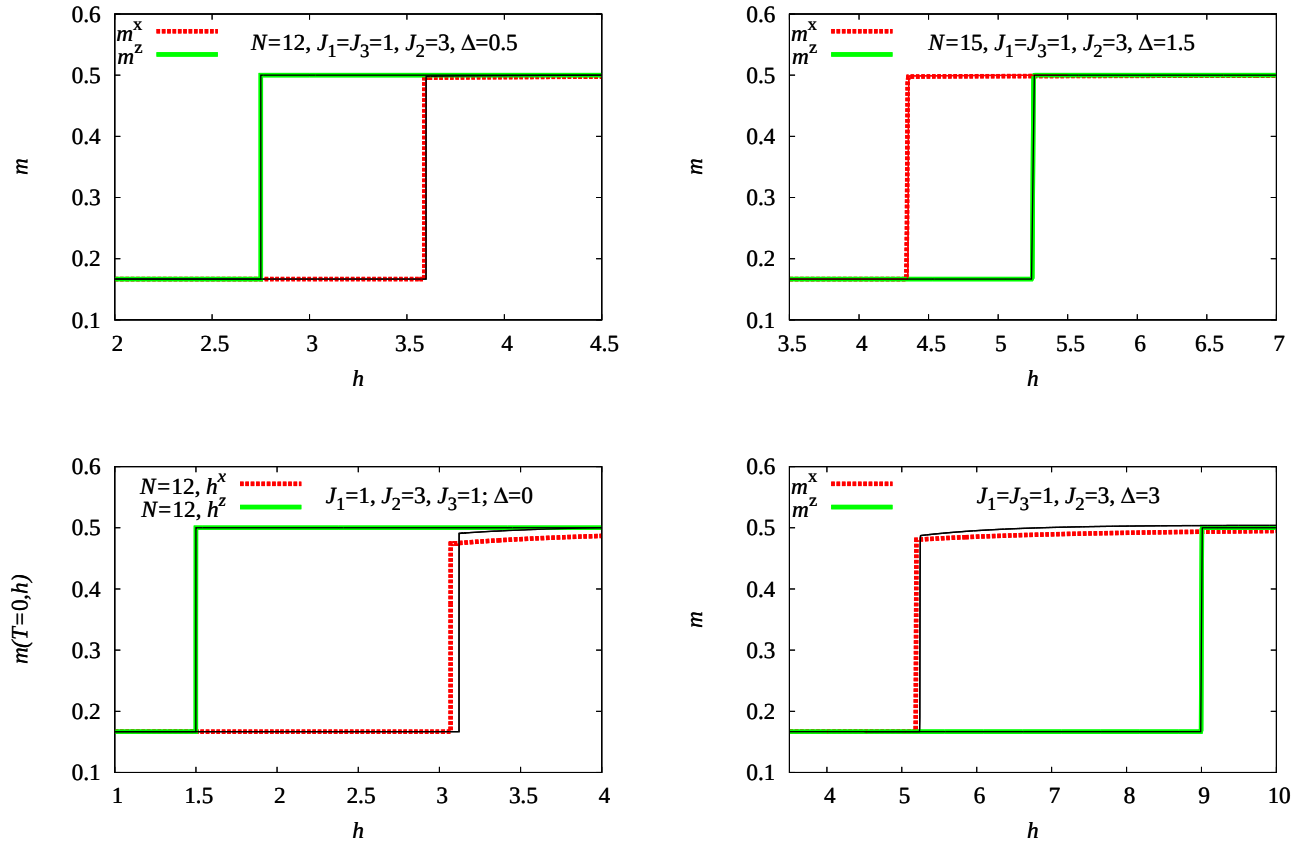


Рис. 4.2 Криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга з параметрами $J_1 = J_3 = 1$, $J_2 = 3$, $\Delta < 1$ (ліва колонка) і $\Delta > 1$ (права колонка) в магнітному полі, прикладеному вздовж осей z (суцільна крива) та x (пунктирна крива). Дані точної діагоналізації отримані для скінченного періодичного ланцюжка з $N = 12$ (ліва колонка) та $N = 15$ (права колонка). Тонкі чорні криві — результати на основі ефективної моделі з використанням ферміонізації Йордана-Вігнера для безмежно великих систем.

до $\frac{1}{2}$. Вираз для характеристичного поля h_* знаходимо з умови $h(h_*) = 0$ [20].

Коли магнітне поле прикладене вздовж осі z , то

$$h_*^z = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J + \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}. \quad (4.12)$$

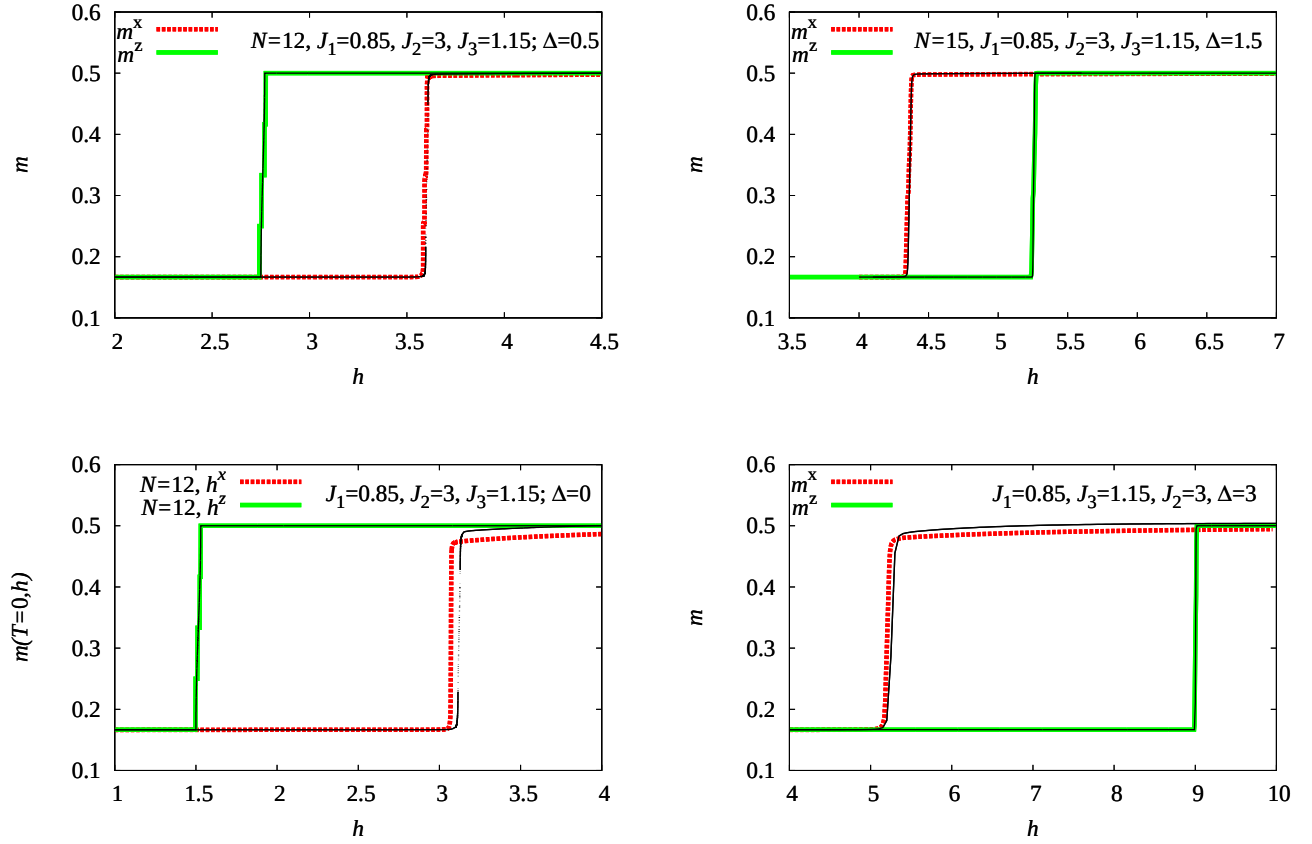


Рис. 4.3 Те саме, що на рис. 4.2, але з $J_1 = 0.85$, $J_2 = 3$, $J_3 = 1.15$.

Відповідно, для поля, прикладеного вздовж осі x , маємо

$$h_*^x \approx \sqrt{\frac{1+\Delta}{2}} J_2 + J + \frac{(J_3 - J_1)^2}{4\sqrt{\frac{1+\Delta}{2}} J_2} \Delta. \quad (4.13)$$

Ці формули справедливі і для випадку $0 \leq \Delta < 1$, і для випадку $\Delta > 1$.

На рис. 4.5 показана залежність величини стрибка кривої намагніченості $\Delta m^x = m^x(h_*^x + 0) - m^x(h_*^x - 0)$ від параметра Δ в магнітному полі, прикладеному вздовж осі x , для $J_2 = 3$, $J_1 = J_3 = 1$ та $J_1 = J_3 = 0$. Розгляньмо випадок, коли $J_1 = J_3 = 0$ (тоді $h_*^x = h_0$). Тоді для виразу для намагніченості для сукупності вертикальних димерів із взаємодією J_2 і вільних спінів у вузлах $m, 3$ можна отримати просту формулу. Справді, для магнітного моменту комірки з

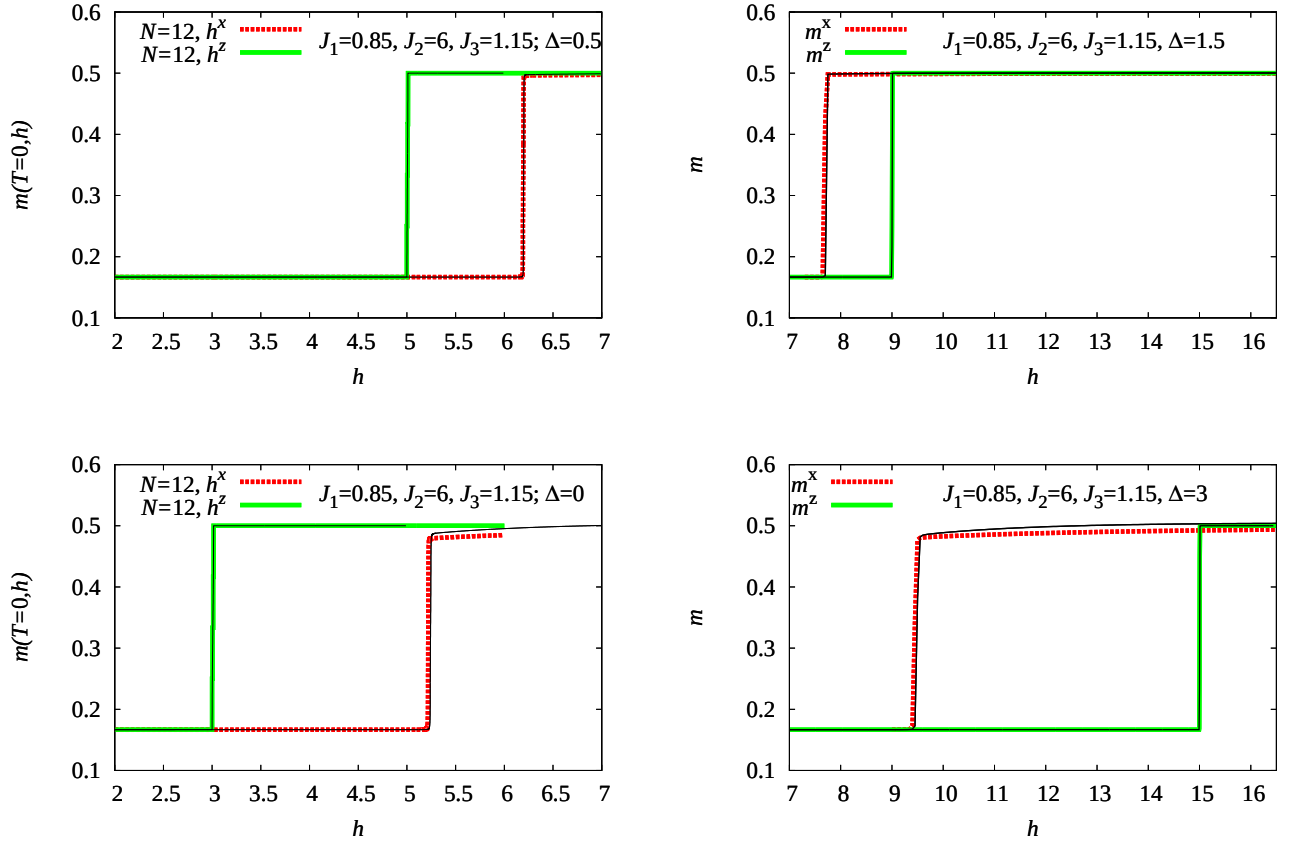


Рис. 4.4 Те саме, що на рис. 4.3, але з $J_1 = 0.85$, $J_2 = 6$, $J_3 = 1.15$.

трьох вузлів у сильному полі маємо:

$$\begin{aligned}
 & (\alpha|\uparrow\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\downarrow\rangle)(s_1^z + s_2^z)(\alpha|\uparrow\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\downarrow\rangle) + \frac{1}{2} \\
 &= (\alpha|\uparrow\uparrow\rangle + \beta|\downarrow\downarrow\rangle)(\alpha|\uparrow\uparrow\rangle - \beta|\downarrow\downarrow\rangle) + \frac{1}{2} \\
 &= \alpha^2 - \beta^2 + \frac{1}{2}.
 \end{aligned} \tag{4.14}$$

Тому для намагніченості в розрахунку на один вузол отримаємо $m^x(h_0 + 0) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{3} + \frac{1}{6}$. Далі, $m^x(h_0 - 0) = \frac{1}{6}$, так що $\Delta m^x \equiv m^x(h_0 + 0) - m^x(h_0 - 0) = \frac{\alpha^2 - \beta^2}{3} \neq 0$ для будь-якого Δ (тонка крива на рис. 4.5). У випадку, коли присутні взаємодії $J_1 = J_3 \neq 0$ (випадок ідеальної геометрії), криві намагніченості можна отримати чисельно, використовуючи точну діагоналізацію для ромбічного ланцюжка з параметрами $J_2 = 3$ і $J_1 = J_3 = 1$ [трикутники та квадратики на рис. 4.5]. На-

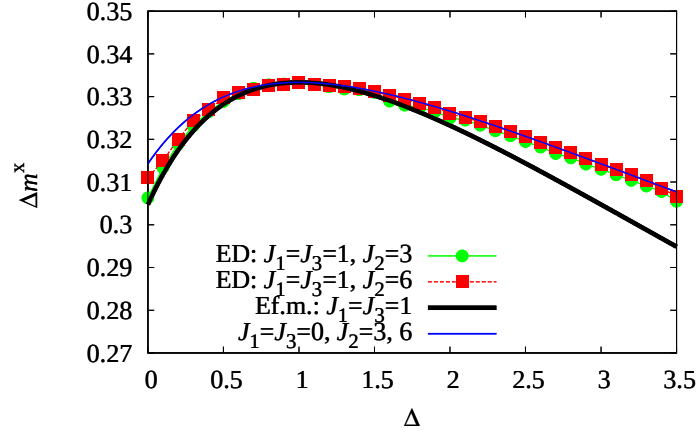


Рис. 4.5 Залежність величини стрибка намагніченості $\Delta m^x = m^x(h_*^x + 0) - m^x(h_*^x - 0)$ фрустрованого ромбічного XXZ ланцюжка Гайзенберга від параметра Δ в магнітному полі, прикладеному вздовж осі x .

решті величину Δm^x можна знайти, використовуючи ефективну модель (4.11) (товста лінія на рис. 4.5). Ефективна модель за умови $J_1 = J_3$ відповідає моделі вільних спінів у зовнішньому магнітному полі.

З рис. 4.5 бачимо, що зі збільшенням значення Δ від 0 до 1 величина стрибка кривої намагніченості збільшується до максимуму при $\Delta = 1$, який становить $\frac{1}{3}$, а з подальшим ростом Δ величина стрибка зменшується і прямує до нуля.

У випадку відхилення від ідеальної геометрії ($J_1 \neq J_3$) стрибок кривої намагніченості у магнітному полі, спрямованому вздовж осі x або вздовж осі z , розмивається і намагніченість стрімко змінює своє значення в околі $h = h_*$ (див. рис. 4.3). Однак, характеристичні поля h_*^z і h_*^x залишаються добре визначеними і у цьому випадку.

4.4. Застосування до азуриту

У статті [59] приведено експериментальні криві намагніченості для азуриту при температурі $T = 1.5$ К у магнітному полі, яке було прикладене вздовж кристалографічної осі b та перпендикулярно до неї, див. рис. 4.6. У випадку,

коли магнітне поле прикладене вздовж осі b , крива намагніченості має плато при $\frac{1}{3}$ значення насичення намагніченості між $H_{c1}^{\parallel} = 16$ Т і $H_{c2}^{\parallel} = 26$ Т, а потім стрімко зростає до насичення при $H_{c3}^{\parallel} = 32.5$ Т. У випадку поля, прикладеного перпендикулярно до осі b , крива намагніченості має плато при $\frac{1}{3}$ значення насичення намагніченості між $H_{c1}^{\perp} = 11$ Т і $H_{c2}^{\perp} = 30$ Т, а потім стрімко зростає до насичення при $H_{c3}^{\perp} = 32.5$ Т.

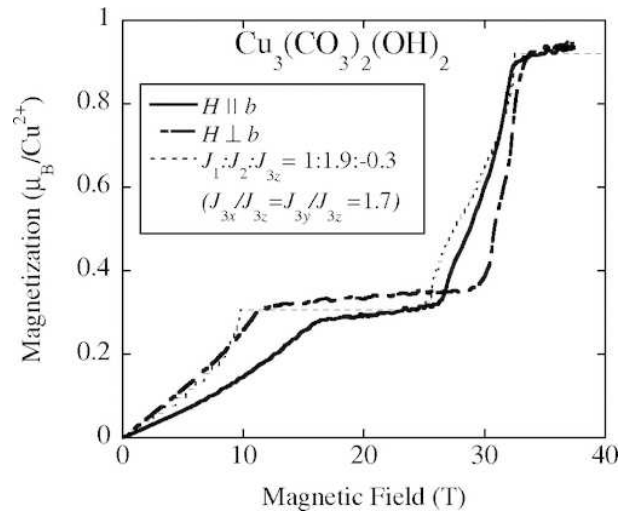


Рис. 4.6 Експериментальні результати для кривої намагніченості азуриту при низьких температурах (взято з статті Н. Kikuchi et al., Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005), див. також рис. 1.7).

З допомогою формул (4.12) та (4.13) можна оцінити величину параметра анізотропії обмінної взаємодії Δ для азуриту на основі експериментальних даних [59]. Припустимо, що умова $\mathbf{H} \parallel b$ відповідає магнітному полю $\mathbf{H}$, прикладеному вздовж осі z . Тоді, використовуючи експериментальне значення магнітного поля, при якому відбувається стрибок у кривій намагніченості $H^{\parallel} \approx 29$ Т, а також параметри для азуриту, з допомогою формули (4.13) отримуємо, що параметр анізотропії Δ для азуриту є $\Delta \approx 0.85$. З іншого боку, умова $\mathbf{H} \perp b$ відповідає випадку, коли магнітне поле прикладене вздовж осі x . Поле при якому відбувається стрибок у кривій намагніченості $H^{\perp} \approx 31$ Т і з формули (4.13) отримаємо, що параметр анізотропії обмінних взаємодій для азуриту

$\Delta \approx 0.84$. Таким чином, теоретичне передбачення для параметра анізотропії обмінних взаємодій у азуриті є $\Delta \approx 0.84 \dots 0.85$.

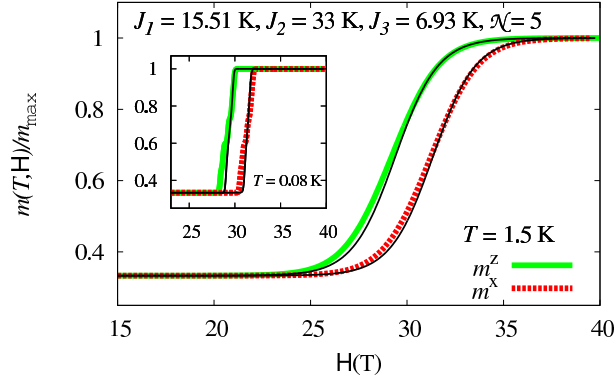


Рис. 4.7 Низькотемпературні криві намагніченості для фрустрованого ромбічного ланцюжка з параметрами для азуриту $J_1 = 15.51\text{K}$, $J_2 = 33\text{K}$, $J_3 = 6.93\text{K}$ і гіромагнітним співвідношенням $g = 2.06$ в магнітному полі, прикладеному вздовж осі z і вздовж осі x (пунктирні криві). Тонкі чорні криві — результати на основі ефективної моделі з використанням ферміонізації Йордана-Вігнера.

Криві намагнічення для параметрів для азуриту при двох температурах $T = 0.08\text{ K}$ і $T = 1.5\text{ K}$ приведені на рис. 4.7. Відзначимо, що для кращої згоди з експериментальними даними потрібно було б ще врахувати 1) взаємодію J_m між вузлами $m, 3$ і $m + 1, 3$ на рис. 4.1 і 2) міжланцюжкову взаємодію.

4.5. Висновки

Побудовано ефективний опис спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітної XXZ моделі Гайзенберга на деформованому ромбічному спіновому ланцюжку в наближенні сильного зв'язку у випадку довільно орієнтованого зовнішнього магнітного поля. Використовуючи ефективні моделі, досліджено низькотемпературні властивості ромбічного спінового ланцюжка з параметром анізотропії обмінних взаємодій Гайзенберга $0 < \Delta < 1$ та $\Delta > 1$ в околі поля насичення. Зокрема, побудовано криві намагніченості для вихідної та ефективних моделей для ідеального та деформованого ромбічного ланцюжка при різних значеннях параметра

Δ у магнітному полі, прикладеному вздовж осі x або вздовж осі z . Отримані ефективні моделі застосовано до обговорення експериментальних даних для природного мінералу азуриту. На основі експериментальних даних розроблена теорія дає змогу оцінити параметр анізотропії обмінних взаємодій для азуриту $\Delta \approx 0.85$.

Підхід, викладений в цьому розділі, застосовний і для пояснення експериментальних даних для іншої магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$, див. додаток Д.5.

РОЗДІЛ 5

ЕФЕКТИВНИЙ ОПИС ФРУСТРОВАНОГО РОМБІЧНОГО ЛАНЦЮЖКА ІЗИНГА-ГАЙЗЕНБЕРГА

Точно розв’язні спінові моделі (які можуть бути розв’язані без будь-яких наближень) мають велике значення в статистичній механіці і фізиці конденсованого стану [136, 137]. Найвідомішими такими моделями є модель Ізинга, вершинні моделі, моделі, які розв’язуються підстановкою Бете, і т.д. До точно розв’язних відносяться і так звані класично-квантові спінові моделі [138]. В цьому розділі розглядається одна із них: $s = \frac{1}{2}$ модель Ізинга-Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку, коли на вертикальному зв’язку є обмінна взаємодія Гайзенберга, а на решті зв’язків – обмінні взаємодії Ізинга, див. рис. 5.1. Інтерес до дослідження регулярнозмінних ланцюжків Ізинга-Гайзенберга зумовлений можливістю отримати точні результати для їх фізичних характеристик. Якщо у регулярнозмінному спіновому ланцюжку є фрагменти, оточені взаємодією Ізинга, то отримати точні результати для його фізичних характеристик дозволяє декораційно-ітераційне перетворення. Цим перетворенням такий ланцюжок зводиться до класичного ланцюжка Ізинга зі взаємодією найближчих сусідів і полем [139–142]. Іншим важливим аргументом на користь дослідження регулярнозмінних ланцюжків Ізинга-Гайзенберга є те, що вони можуть моделювати певні магнітні матеріали [143].

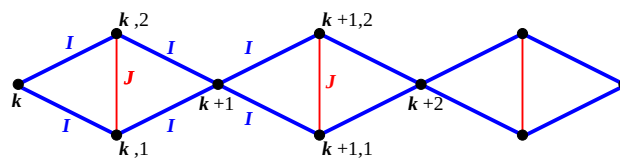


Рис. 5.1 Фрустрований ромбічний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга з взаємодіями Ізинга I та взаємодіями Гайзенберга J .

Ця модель враховує взаємодію Гайзенберга J уздовж вертикальних зв'язків і взаємодію Ізинга I на зв'язках, які оточують J -взаємодії, формуючи ромбічний ланцюжок. Іншими словами, квантові спіни Гайзенберга (s -спіни) розташовані на верхніх і нижніх вузлах вертикальних димерів, а спіни Ізинга (μ -спіни) розташовані на вузлах, які з'єднують між собою димери, тобто k вузли, $k = 1, \dots, \mathcal{N}$, і $N = 3\mathcal{N}$ є загальна кількість вузлів у ромбічному ланцюжку, див. рис. 5.1. Гамільтоніан $s = \frac{1}{2}$ моделі Ізинга-Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку має наступний вигляд:

$$H_0 = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} H_{k,k+1},$$

$$H_{k,k+1} = I(\mu_k^z + \mu_{k+1}^z)(s_{k,1}^z + s_{k,2}^z) + J\mathbf{s}_{k,1} \cdot \mathbf{s}_{k,2} - h(\mu_k^z + s_{k,1}^z + s_{k,2}^z). \quad (5.1)$$

Ця модель є точно розв'язана [144–147] і всі термодинамічні величини можуть бути пораховані точно. Зокрема, основний стан спін- $\frac{1}{2}$ ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга є відомий і він залежить від співвідношення між константами I та J . Ми розглянемо випадок, коли $I > J > 0$.

Якщо додати до вихідної Ізингової взаємодії малу XY частину, тобто, $H_0 \rightarrow H = H_0 + V$, де

$$V = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} V_{k,k+1},$$

$$V_{k,k+1} = \frac{\delta I}{2} \left[(\mu_k^+ + \mu_{k+1}^+) (s_{k,1}^- + s_{k,2}^-) + (\mu_k^- + \mu_{k+1}^-) (s_{k,1}^+ + s_{k,2}^+) \right], \quad (5.2)$$

і $\delta < 1$ є малим параметром, то модель більше не розв'язна точно декораційно-ітераційним перетворенням. Наша мета – побудувати ефективний гамільтоніан для опису низькотемпературних властивостей моделі з гамільтоніаном H , який мало відрізняється від гамільтоніана H_0 (δ мале). Побудова ефективного гамільтоніана залежить від набору основних станів гамільтоніана H_0 , які залежать від величини зовнішнього магнітного поля h .

5.1. Ефективний гамільтоніан поблизу поля насичення

Розпочнімо з випадку *сильних магнітних полів*. Основний стан гамільтоніана H_0 вище поля насичення має вигляд

$$\dots (|\uparrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k-1} (|\uparrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_k (|\uparrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k+1} \dots \quad (5.3)$$

з енергією $(I + J/4 - 3h/2)\mathcal{N}$. Основний стан гамільтоніана H_0 нижче поля насичення є

$$\dots (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k-1} (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_k (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k+1} \dots \quad (5.4)$$

з енергією $(-I + J/4 - h/2)\mathcal{N}$. Поле насичення h_{sat} отримується з рівняння

$$I + J/4 - 3h_{\text{sat}}/2 = -I + J/4 - h_{\text{sat}}/2$$

і є таким: $h_{\text{sat}} = 2I$. При полі насичення основний стан є $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений: кожен μ -спін може бути спрямований або вгору $\uparrow$ або вниз $\downarrow$ без зміни енергії основного стану $\varepsilon_0 = (-2I + J/4)\mathcal{N}$. Введемо проектор основного стану H_0 при $h = h_{\text{sat}}$

$$\begin{aligned} P &= |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| = \otimes_{k=1}^{\mathcal{N}} (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_k, \\ |u\rangle &= |\uparrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle, \quad |d\rangle = |\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle. \end{aligned} \quad (5.5)$$

Зручно також ввести наступні (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ оператори

$$\begin{aligned} T_k^z &= \frac{1}{2} (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|)_k, \\ T_k^+ &= (|u\rangle\langle d|)_k, \quad T_k^- = (|d\rangle\langle u|)_k, \\ T_k^x &= \frac{1}{2} (T_k^+ + T_k^-), \quad T_k^y = \frac{1}{2i} (T_k^+ - T_k^-). \end{aligned} \quad (5.6)$$

Ефективний гамільтоніан може бути розрахований, використовуючи операторну теорію збурень, з формули [100–103]

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots, \quad (5.7)$$

де $|\varphi_\alpha\rangle$, $\alpha \neq 0$ є збуджені стани гамільтоніана H_0 при $h = h_{\text{sat}}$.

Обчисливши кожний доданок рівняння (5.7) і використавши рівняння (5.6), ми отримаємо наступний ефективний гамільтоніан

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N}\mathcal{C} + \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left[-h_{\text{eff}} T_k^z + J_{\text{eff}} (T_k^x T_{k+1}^x + T_k^y T_{k+1}^y) + J_{\text{eff}}^z T_k^z T_{k+1}^z \right],$$

$$\mathcal{C} = \frac{J}{4} - h - \frac{3\delta^2 I}{8},$$

$$h_{\text{eff}} = h - 2I - \frac{\delta^2 I}{2}, \quad J_{\text{eff}} = -\delta^2 I, \quad J_{\text{eff}}^z = \frac{\delta^2 I}{2}. \quad (5.8)$$

Отримана ефективна модель (5.8) є спін- $\frac{1}{2}$ XXZ ланцюжок Гайзенберга у вздовжньому магнітному полі (прикладеному вздовж осі z). Порівняно з початковою моделлю, ефективна модель містить лише $\mathcal{N} = N/3$ вузлів і є нефрустрована.

Отже, можемо зробити підсумки: початкову модель, що задається гамільтоніаном $H = H_0 + V$ [див. рівняння (5.1) і (5.2)] з $I > J > 0$ поблизу $h \approx 2I$ для $\delta < 1$ можна описати ефективним гамільтоніаном H_{eff} (5.8). Як наслідок, для вільної енергії початкової та ефективної моделей маємо

$$-\frac{1}{N} T \ln \text{Tr} \exp \left(-\frac{H_0 + V}{T} \right) \Rightarrow -\frac{1}{3\mathcal{N}} T \ln \text{Tr} \exp \left(-\frac{H_{\text{eff}}}{T} \right), \quad (5.9)$$

що є справедливо для $h \approx 2I$, $\delta < 1$ і при низьких температурах.

Виконаємо перевірку отриманої ефективної моделі (5.8) чисельно, використовуючи метод точної діагоналізації та метод ренормалізаційної групи для матриці густини. Зокрема, розглянемо ланцюжки з $\mathcal{N} = 4, \dots, 12$ комірок з періодичними граничними умовами для обчислень методом точної діагоналізації, та відкриті ланцюжки з $\mathcal{N} = 50$ комірок для обчислень методом ренормалізаційної групи для матриці густини з набором параметрів $I = 1$, $\delta = 0.2 \dots 0.5$, $J = 0.5$, $h = 1.5 \dots 3$.

Обчислимо низькотемпературні криві намагніченості $m(T, h)$ та криві питомої теплоємності для початкової та ефективної моделей $c(T, h)$, див. рис. 5.2, та

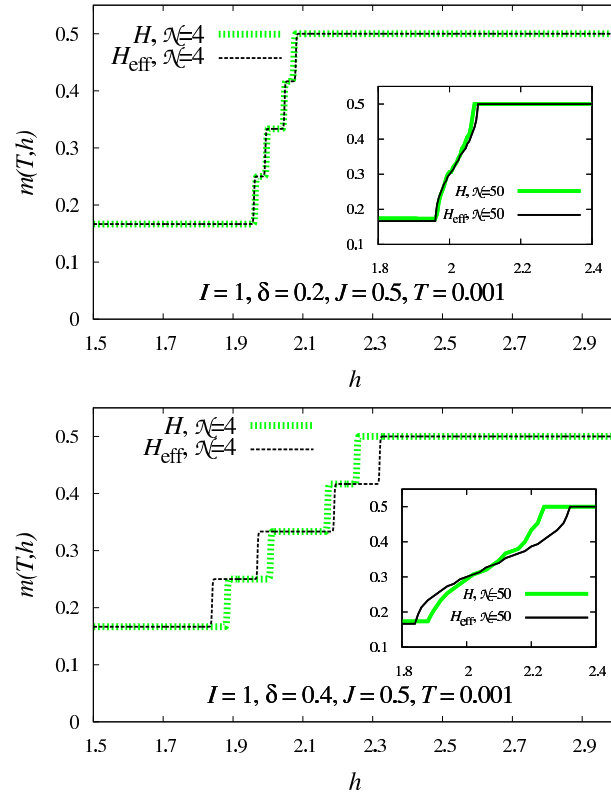


Рис. 5.2 Низькотемпературні криві намагніченості $m(T, h)$ в залежності від магнітного поля h для початкової моделі (5.1), (5.2) (товсті зелені криві) та ефективної моделі (5.8) (тонкі чорні криві) з параметрами $I = 1$, $\delta = 0.2$ (верхня панель) і $\delta = 0.4$ (нижня панель), $J = 0.5$, $T = 0.001$. Дані точної діагоналізації виконані для $\mathcal{N} = 4$ (пунктирні криві), дані методу ренормалізаційної групи для матриці густини отримані для $\mathcal{N} = 50$ (суцільні криві).

рис. 5.3. З рис. 5.2, бачимо, що як тільки δ трохи відрізняється від 0, то стрибок кривої намагніченості при $h = 2I$ між однією третьою значення насичення намагніченості $m_{\text{sat}} = m(0, \infty) = 1/2$ та насиченням намагніченості m_{sat} розмивається, тобто існує область магнітних полів $h_l \leq h \leq h_h$, в якій стрибок кривої намагніченості при нульовій температурі, перетворюється у стрімко змінну криву. Ефективна теорія добре описує таку поведінку намагніченості до $\delta = 0.3$. Наявність такого фрагменту у кривій намагніченості свідчить про існування фази спінової рідини в квантовому ланцюжку перед тим, як намагніченість досягає насичення. З рис. 5.2 видно, що ефективна теорія дещо переоцінює межі магнітного поля $h_l = 2I - \delta^2 I$ та $h_h = 2I + 2\delta^2 I$, в якому намагніченість змінюється неперервно. Ефекти скінченних розмірів ґратки, які присутні в обчисленнях намагніченості методом точної діагоналізації (див. рис. 5.2, головна панель) можна легко оцінити, порівнявши з результатами методу ренормалізаційної групи для матриці густини (див. рис. 5.2, вставка).

Температурні залежності кривих питомої теплоємності в магнітних полях в околі поля насичення показані на рис. 5.3. У фазі спінової рідини ми очікуємо лінійного зростання теплоємності з температурою. Відхилення від лінійного закону зростання теплоємності при $T \rightarrow 0$, що присутні на рис. 5.3, пов'язані з скінченністю розмірів системи. У фазах поза спіноюю рідиною теплоємність експоненційно згасає, що добре видно з рис. 5.3; у цьому режимі ефекти скінченних розмірів є малими.

На рис. 5.4 показана фазова діаграма основного стану ромбічного спінового ланцюжка Ізинга-Гайзенберга в h - δ площині, яка була отримана з використанням методу ренормалізаційної групи для матриці густини для початкової та ефективної моделей.

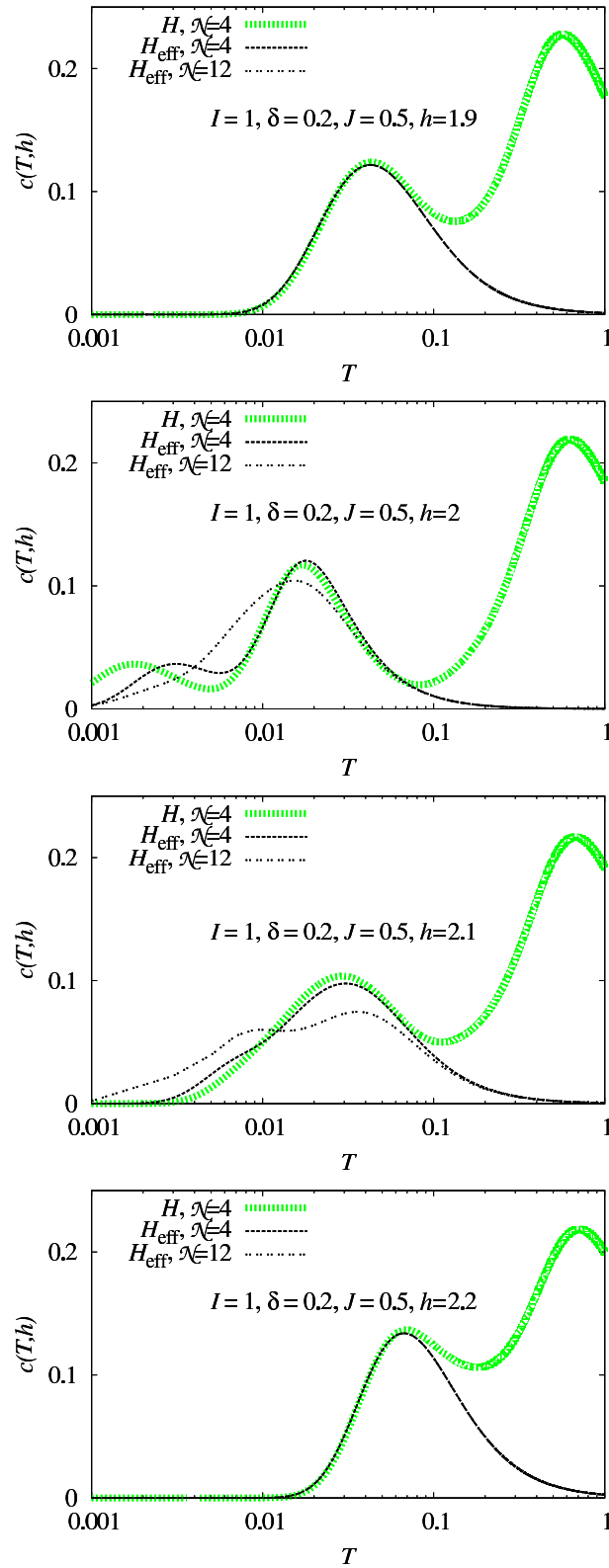


Рис. 5.3 Температурна залежність питомої теплоємності $c(T, h)$ в сильних магнітних полях для вихідної моделі (5.1), (5.2) (товсті зелені криві) та ефективної моделі (5.8) (тонкі чорні криві) з $I = 1$, $\delta = 0.2$, $J = 0.5$, $h = 1.9, 2, 2.1, 2.2$ (згори донизу). Дані точної діагоналізації отримані для $\mathcal{N} = 4$ і $\mathcal{N} = 12$ (пунктирні криві).

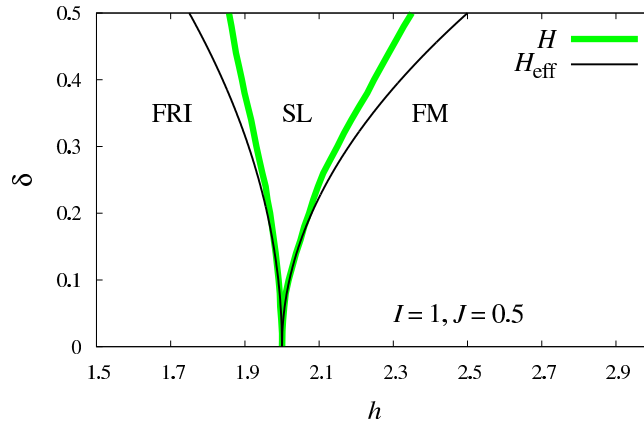


Рис. 5.4 Фазова діаграма для основного стану в площині h - δ . Є три фази в фазовій діаграмі: ферімагнітна фаза (FRI), фаза спінової рідини (SL) та повністю намагнічена фаза (FM). Передбачення ефективної моделі (тонкі суцільні чорні криві): $\delta(h) = \sqrt{2 - h/I}$, $h \leq 2I$ (ліва межа для фази спінової рідини) і $\delta(h) = \sqrt{2 - h/I}/\sqrt{2}$, $h \geq 2I$ (права межа для фази спінової рідини). Результати для початкової моделі (товсті суцільні зелені криві) отримані методом ренормалізаційної групи для матриці густини для ланцюжка з відкритими граничними умовами з $\mathcal{N} = 50$ вузлів.

5.2. Ефективний гамільтоніан, якщо поле мале

У випадку *малих магнітних полів*, основний стан гамільтоніана H_0 для нескінченно малих полів $h > 0$ є

$$\dots (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k-1} (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_k (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k+1} \dots \quad (5.10)$$

з енергією $(-I + J/4 - h/2)\mathcal{N}$. Основний стан гамільтоніана H_0 для нескінченно малих полів $h < 0$ є

$$\dots (|\uparrow\rangle|\downarrow_1\downarrow_2\rangle)_{k-1} (|\uparrow\rangle|\downarrow_1\downarrow_2\rangle)_k (|\uparrow\rangle|\downarrow_1\downarrow_2\rangle)_{k+1} \dots \quad (5.11)$$

з енергією $(-I + J/4 + h/2)\mathcal{N}$. При $h = 0$ основний стан є 2-кратно вироджений і ефективний гамільтоніан, який діє в цьому підпросторі є

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N} \left(-I + \frac{J}{4} - \frac{\delta^2 I}{2} - hT^z \right), \quad (5.12)$$

детальніше, див. додаток Д.6.

5.3. Висновки

Точно розв'язний спін- $\frac{1}{2}$ ромбічний геометрично фрустрований ланцюжок Ізинга-Гайзенберга узагальнено шляхом додавання до взаємодії Ізинга малої XU частини. Використовуючи операторну теорію збурень, побудовано низько-температурний ефективний гамільтоніан, який описує поведінку вихідної моделі в околі поля насичення, при якому в ланцюжку Ізинга-Гайзенберга відбувається перехід з ферімагнітного в насичений парамагнітний стан, і в околі нульового поля. Використовуючи точну діагоналізацію, а також метод ренормалізаційної групи для матриці густини, побудовані криві намагніченості та теплоємності для вихідної та ефективної моделей. Показано, що додавання XU частини до ізингової взаємодії призводить до появи фази спінової рідини, в якій польова залежність намагніченості змінюється неперервно, між ферімагнітною фазою з намагніченістю $1/3$ і повністю намагніченою фазою. Розроблений підхід може бути застосований для квантового узагальнення інших гібридних класично-квантових систем, подібних до розглянутої системи Ізинга-Гайзенберга.

РОЗДІЛ 6

ЛОКАЛІЗОВАНІ МАГНОНИ В РОМБІЧНОМУ ЛАНЦЮЖКУ ТА МІЖЛАНЦЮЖКОВІ ВЗАЄМОДІЇ

У реальних низьковимірних сполуках завжди присутні міжланцюжкові чи міжплощинні взаємодії, через які система, можливо при дуже низьких температурах, виявляє тривимірну поведінку. Важливе питання: як врахування міжланцюжкових взаємодій змінить фізику, зумовлену локалізованими магнонами, коли мова йде, скажімо, про ланцюжки, що допускають існування локалізованих магنونів?

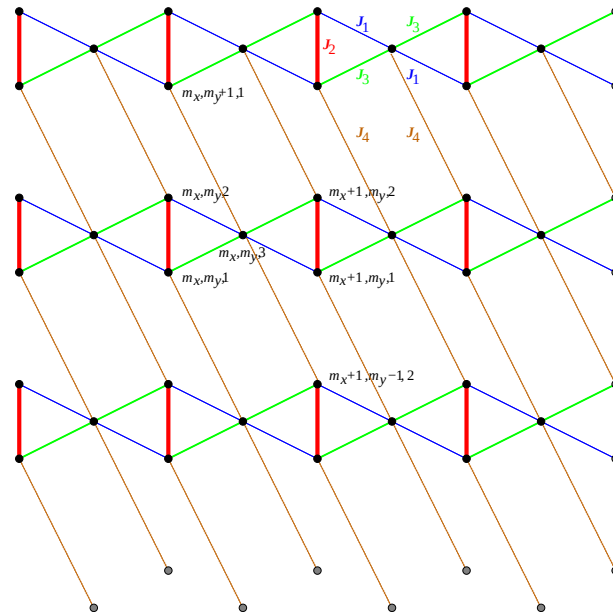


Рис. 6.1 Двовимірна система слабо взаємодіючих ромбічних спінових ланцюжків, див. [149]. J_2 є найсильнішою обмінною взаємодією і створює умову для локалізації магнона з $J_1 = J_3 < J_2/2$ (ідеальна геометрія) і $J_1 \neq J_3$, $J_1 + J_3 < J_2$, $|J_1 - J_3|/J_2 \ll 1$ (деформована геометрія), та J_4 – найслабша обмінна взаємодія, що з'єднує ромбічні ланцюжки.

6.1. Система ромбічних спінових ланцюжків. Ефективна модель.

Будемо розглядати спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітну XXZ модель Гайзенберга у двовимірній системі слабо взаємодіючих ромбічних ланцюжків у магнітному полі з гамільтоніаном

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) - h \sum_{i=1}^N s_i^z, \quad (6.1)$$

див. рис. 6.1. Тут перша сума нумерує всі сусідні зв'язки ґратки, яка складається з N вузлів, де $J_{ij} > 0$ є антиферромагнітна обмінна взаємодія між сусідніми вузлами i та j і вона набуває різних значень, які показані на рис. 6.1, та $0 \leq \Delta \leq 1$ є параметром анізотропії обмінних взаємодій XY -типу. Крім того на ґратку накладаються періодичні граничні умови.

Як і раніше, вважатимемо, що обмінна взаємодія на димері $J_2 > 0$ є домінуючою. Для опису системи ромбічних спінових ланцюжків при низьких температурах та сильних полях, будемо використовувати наближення сильного зв'язку. Будемо розглядати сукупність вертикальних димерів $\mathcal{N} = N/3$ (J_2 зв'язки) та $\mathcal{N}$ ізолюваних вузлів, позначених $\mathbf{m}, 3$ як основну частину вихідного гамільтоніана і позначимо її як H_{main} , де $h_0 = (1 + \Delta)J_2/2$. Решту гамільтоніана (6.1) (яка містить перехресні обмінні взаємодії в ланцюжку J_1 , J_3 , міжланцюжкові взаємодії J_4 і доданок Зеємана з полем $h - h_0$) будемо розглядати як збурення $V = H - H_{\text{main}}$. В режимі сильних магнітних полів вертикальний димер може перебувати в стані $|u\rangle = |\uparrow_1\uparrow_2\rangle$ або в стані $|d\rangle = (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)/\sqrt{2}$ (енергії цих станів збігаються, коли $h = h_0$), а спіни на вузлах $\mathbf{m}, 3$ є спрямовані вгору $|\uparrow\rangle$. Отже основний стан $|\varphi_0\rangle$ гамільтоніана H_{main} є $2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджений при $h = h_0$. Після додавання збурення V і, використовуючи операторну теорію збурень, ми побудуємо ефективний гамільтоніан H_{eff} , який діє лише в просторі

станів $|\varphi_0\rangle$, але дає точну енергію основного стану гамільтоніана H ,

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots, \quad (6.2)$$

де $P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$ є оператором проектування на основний стан гамільтоніана H_{main} і $|\varphi_\alpha\rangle$ ($\alpha \neq 0$) є збуджені стани гамільтоніана H_{main} , порівняй з (3.6), (3.43), (5.7). Далі, щоб записати вираз для ефективного гамільтоніана (6.2) в більш зручній формі, використовуємо (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ див. (3.10) оператори $T^z = (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|)/2$, $T^+ = |u\rangle\langle d|$, та $T^- = |d\rangle\langle u|$. Після нескладних обчислень отримаємо такий вираз для ефективного гамільтоніана:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= \mathcal{N}\mathcal{C} + \sum_{(mn)} J_{mn} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) - \hbar \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z, \\ \mathcal{C} &= -h - \frac{J_2}{4} + \Delta \frac{J_1 + J_3 + J_4}{4} - \frac{(J_1 - J_3)^2 + J_4^2}{4(1 + \Delta)J_2}, \\ J_h &= J_{m_x, m_y; m_x+1, m_y} = \frac{(J_1 - J_3)^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \\ J_v &= J_{m_x, m_y; m_x, m_y+1} = \frac{J_4(J_1 - J_3)}{(1 + \Delta)J_2}, \\ J_d &= J_{m_x, m_y; m_x+1, m_y-1} = -\frac{J_4(J_1 - J_3)}{(1 + \Delta)J_2}, \\ J_D &= J_{m_x, m_y+1; m_x+1, m_y-1} = \frac{J_4^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \\ \hbar &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2 + J_4^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \\ h_1 &= \frac{1 + \Delta}{2}J_2 + \Delta \frac{J_1 + J_3 + J_4}{2}. \end{aligned} \quad (6.3)$$

Тут перша сума позначає всі зв'язки квадратної ґратки, яка складається з $\mathcal{N} = N/3$ вузлів (див. рис. 6.2), J_{mn} набувають чотирьох різних значень, J_h , J_v , J_d , та J_D , див. рис. 6.2.

Отримана ефективна модель є (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ ізотропна XU модель на квадратній ґратці в поперечному магнітному полі. Незважаючи на те, що ефективна модель містить чотири різних обмінних взаємодії вона є нефрустрована. В

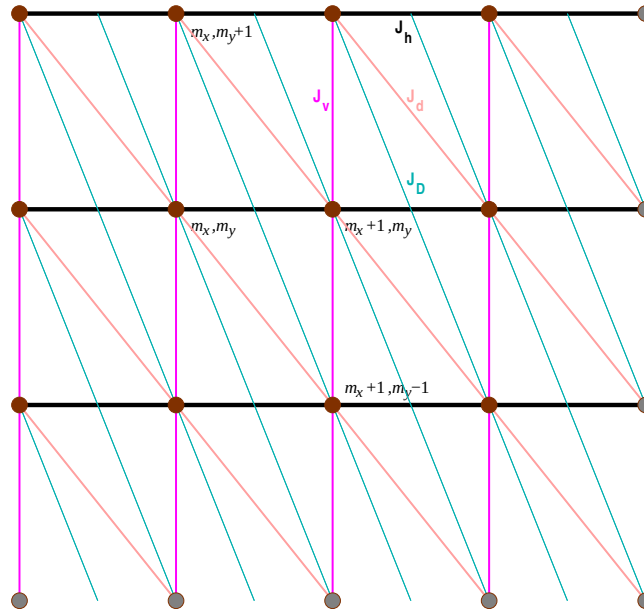


Рис. 6.2 Ефективна (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ ізотропна XY модель на квадратній ґратці в поперечному магнітному полі.

граничному випадку, коли $J_4 = 0$, рівняння (6.3) збігається з результатами, які були отримані раніше в роботах [18–20, 55], а також див. розділ 3. В іншому граничному випадку, коли $J_1 = J_3 = J$ але $J_4 \neq 0$, то $J_h = J_v = J_d = 0$ але $J_D \neq 0$ в рівнянні (6.3), тобто отримаємо спін- $\frac{1}{2}$ XY ланцюжок в поперечному полі. Ця ефективна модель є точно розв'язна методом ферміонізації Йордана-Вігнера [105]. Крім того, можна розглянути випадок, коли $J_4/|J_1 - J_3| \ll 1$. Тоді взаємодією J_D можна знехтувати і ми отримаємо неоднорідну спін- $\frac{1}{2}$ XY модель на трикутній ґратці в поперечному магнітному полі.

6.2. Результати точної діагоналізації

Для того, щоб порівняти результати вихідної моделі (6.1) з отриманою ефективною моделлю (6.3), використаємо метод точної діагоналізації для (періодичних) скінченних систем. Будемо розглядати вихідну модель, яка складається з $N = 36$ вузлів, що відповідає або 1) 3 ромбічним ланцюжкам з 12 вузлів або 2) 4 ромбічним ланцюжкам з 9 вузлів з набором параметрів $J_2 = 3$, $J_1 = J_3 = 1$

(ідеальна геометрія), $J_1 = 0.85$, $J_3 = 1.15$ (деформована геометрія і $\Delta = 1$ та $\Delta = 0$). Зосередимося на кривих намагніченості, див. рис. 6.2 та 6.3.

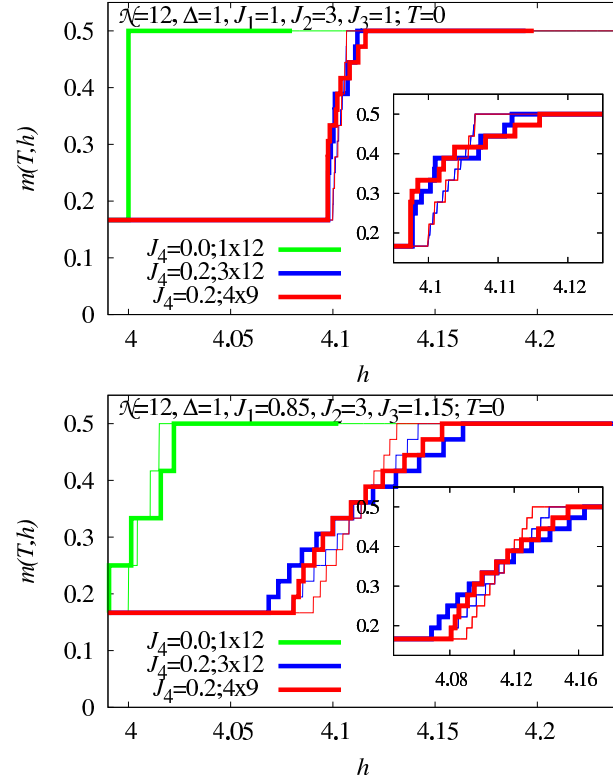


Рис. 6.3 Криві намагніченості $m(T = 0, h)$ для набору параметрів $\Delta = 1$, $J_2 = 3$, $J_1 = J_3 = 1$ (ідеальна геометрія, верхня панель), $J_1 = 0.85$, $J_3 = 1.15$ (деформована геометрія, нижня панель) і $J_4 = 0$ (зелені криві) і $J_4 = 0.2$ (сині та червоні криві). Дані точної діагоналізації стосуються системи, яка складається з $N = 36$ вузлів (вихідна модель) або з $\mathcal{N} = 12$ вузлів (ефективна модель) з періодичними граничними умовами. Товсті лінії відповідають даним вихідних моделей, тонкі криві позначають результати ефективної моделі.

Як видно з рис. 6.3 та 6.4, стрибок кривої намагніченості до насичення – яскрава особливість завдяки існуванню локалізованих магнонів в системі $[4, 7, 8]$ – розмивається, якщо $J_4 \neq 0$. Краще узгодження даних вихідної та ефективної моделей досягається, коли $\Delta \rightarrow 0$.

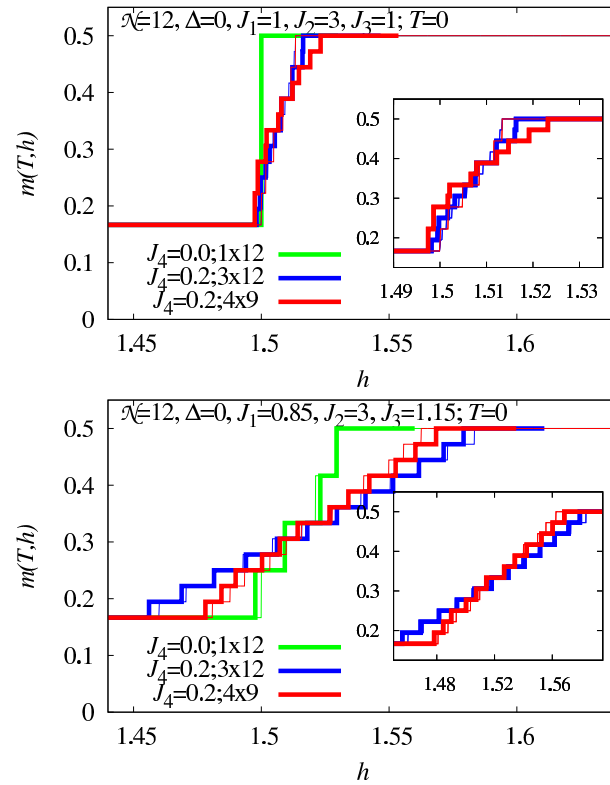


Рис. 6.4 Те саме, що й на рис. 3.2, але для $\Delta = 0$.

6.3. Висновки

Використовуючи наближення сильного зв'язку, побудовано ефективний опис системи фрустрованих ромбічних ланцюжків при наявності слабкої міжланцюжкової взаємодії. Отримана ефективна модель є (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ ізотропна ХУ модель на квадратній ґратці. Вона є нефрустрована і має втричі менше вузлів, ніж вихідна модель. Ефективна модель допускає застосування методу квантового Монте Карло. Використовуючи точну діагоналізацію для вихідної та ефективної моделей, побудовано криві намагніченості $m(T = 0, h)$ і продемонстровано якість ефективного опису.

Наявність міжланцюжкових взаємодій призводить до розмиття стрибка кривої намагніченості. Розмиття стрибка кривої намагніченості в режимі низьких температур в околі поля насичення може бути спричиненим і неідеальною геометрією ґратки, і міжланцюжковими взаємодіями.

ВИСНОВКИ

1. Запропоновано евристичний анзац для статистичної суми деформованого фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка при низьких температурах і сильних магнітних полях. Це дозволило отримати вільну енергію деформованого ромбічного спінового ланцюжка. Результати нашої наближеної аналітичної теорії можна застосувати і до інших спінових систем (наприклад, димер-плакетного ланцюжка чи ґратки квадратне кагоме). Результати опубліковано в [17].
2. Досліджено $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітну модель Гайзенберга на кількох фрустрованих ґратках (ромбічний і димер-плакетний ланцюжки, а також ґратка квадратне кагоме) з майже бездисперсійними одномагнетонними станами. Розроблено систематичну теорію для пояснення низькотемпературних властивостей даних моделей в сильному магнітному полі за умови малих відхилень від ідеальної геометрії (коли магнетонні зони строго бездисперсійні). Побудовані ефективні моделі є значно простішими за вихідні і їх набагато легше досліджувати аналітично чи чисельно. Результати опубліковано в [18, 19].
3. У двовимірному випадку виявлено квантову спінову систему у якій реалізується фазовий перехід Березінського-Костерліца-Таулеса. Результати опубліковано в [18, 19].
4. Врахувавши анізотропію обмінних взаємодій Гайзенберга та довільність напрямку прикладеного зовнішнього магнітного поля, побудовано ефективні моделі для ромбічного спінового ланцюжка, які працюють при низьких температурах і сильних магнітних полях. З допомогою точної діагоналізації побудовані криві намагніченості для вихідної та отрима-

них ефективних моделей, що дозволило з'ясувати застосовність ефективного опису. Отримані ефективні моделі застосовано для пояснення експериментальних даних для природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. Цей підхід може бути застосовний і для інших твердотільних реалізацій фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга з майже бездисперсійними однамагнетонними станами. Результати опубліковано в [20, 21].

5. Для квантового узагальнення точно розв'язаного спіну- $\frac{1}{2}$ геометрично фрустрованого ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга до взаємодій Ізинга додано малу XU частину. Побудовано ефективний гамільтоніан, який описує низькотемпературну поведінку повністю квантової моделі в широкому інтервалі магнітних полів. Використовуючи точну діагоналізацію і метод ренормалізаційної групи для матриці густини, досліджено польову поведінку намагніченості та низькотемпературну поведінку теплоємності для вихідної та ефективної моделей. Показано, що додавання XU частини призводить до появи фази спінової рідини, в якій польова залежність намагніченості змінюється неперервно, між феррімагнітною фазою з намагніченістю $\frac{1}{3}$ і повністю намагніченою фазою. Результати опубліковано в [22].
6. Для системи фрустрованих ромбічних спінових ланцюжків з слабкою міжланцюжковою взаємодією запропоновано ефективний опис в наближенні сильного зв'язку. Методом точної діагоналізації досліджено криві намагніченості для вихідної та ефективних моделей. Показано, що наявність міжланцюжкових взаємодій в системі приводить до розмиття стрибка в кривій намагніченості, зумовленого локалізованими магнонами. Результати опубліковано в [24].

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. *Lhuillier, C.* in High Magnetic Fields: Applications in Condensed Matter Physics and Spectroscopy / C. Lhuillier and G. Misguich // Lecture Notes in Physics Vol. 595, edited by C. Berthier, L. P. Lévy, and G. Martinez (Springer, Berlin, 2002), Pp. 161-190.
2. *Misguich, G.* Two-dimensional quantum antiferromagnets / G. Misguich and C. Lhuillier // in Frustrated Spin Systems, edited by H. T. Diep (World Scientific, Singapore, 2005), Pp. 229-306.
3. *Richter, J.* in Quantum Magnetism / J. Richter, J. Schulenburg, and A. Honecker // Lecture Notes in Physics Vol. 645, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop (Springer, Berlin, 2004) , pp. 85-153.
4. *Schulenburg, J.* Macroscopic Magnetization Jumps Due to Independent Magnons in Frustrated Quantum Spin Lattices / J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, and H.-J. Schmidt // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol. 88, no. 16. – Pp. 167207-1-4.
5. *Schnack, J.* Independent magnon states on magnetic polytopes / J. Schnack, H.-J. Schmidt, J. Richter, and J. Schulenburg // *Eur. Phys. J. B* – 2001. – Vol. 24. – Pp. 475-1-6.
6. *Schmidt, H.-J.* Linear energy bounds for Heisenberg spin systems / H.-J. Schmidt // *J. Phys. A: Math. Gen.* – 2002. – Vol. 35, no. 31. – Pp. 6545-6555.
7. *Richter, J.* Exact eigenstates and macroscopic magnetization jumps in strongly frustrated spin lattices / J. Richter, J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, and H.-J. Schmidt // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2004. – Vol. 16, no. 11. – Pp. S779–S784.

8. *Richter, J.* Magnetic-Field Induced Spin-Peierls Instability in Strongly Frustrated Quantum Spin Lattices / J. Richter, O. Derzhko, and J. Schulenburg // *Phys. Rev. Lett.* – 2004. – Vol. 93, no. 10. – Pp. 107206-1-4.
9. *Zhitomirsky, M. E.* Magnetocaloric effect in one-dimensional antiferromagnets / M. E. Zhitomirsky and A. Honecker // *J. Stat. Mech.* – 2004. – P07012.
10. *Zhitomirsky, M. E.* Exact low-temperature behavior of a kagome antiferromagnet at high fields / M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu // *Phys. Rev. B* – 2004. – Vol. 70. – Pp. 100403-1-4.
11. *Derzhko, O.* Finite low-temperature entropy of some strongly frustrated quantum spin lattices in the vicinity of the saturation field / O. Derzhko and J. Richter // *Phys. Rev. B* – 2004. – Vol. 70, no. 10. – Pp. 104415-1-6.
12. *Kikuchi, H.* Experimental Observation of the 1/3 Magnetization Plateau in the Diamond-Chain Compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta // *Phys. Rev. Lett.* – 2005. – Vol. 94, no. 22. – Pp. 227201-1-4.
13. *Kikuchi, H.* Magnetic Properties of the Diamond Chain Compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, K. Kindo, A. Matsuo, W. Higemoto, K. Nishiyama, M. Horvatić, and C. Berthier // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* – 2005. – no. 159, 1.
14. *Kikuchi, H.* Magnetic properties of the novel frustrated lattice magnet likasite / H. Kikuchi, K. Kunieda, T. Asano, Y. Fujii, Y. Inagaki, A. Matsuo, and K. Kindo // *Physics Procedia*, 20th International Conference on Magnetism – 2015. – Vol. 75. – Pp. 653–658.
15. *Tanaka, H.* Almost Perfect Frustration in the Dimer Magnet $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ / H. Tanaka, N. Kurita, M. Okada, E. Kunihiro, Y. Shirata, K. Fujii, H. Uekusa, A. Matsuo, K. Kindo, and H. Nojiri // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2014. – Vol. 83, no. 10. Article ID: 103701.

16. *Fujihala, M.* Spin-Liquid Ground State in the Spin- $\frac{1}{2}$ Distorted Diamond Chain Compound $K_3Cu_3AlO_2(SO_4)_4$ / M. Fujihala, H. Koorikawa, S. Mitsuda, M. Hagihala, H. Morodomi, T. Kawae, A. Matsuo, and K. Kindo // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2015. – Vol. 84, no. 7. – Pp. 073702-073706.
17. *Derzhko, O.* Semiquantitative theory for high-field low-temperature properties of distorted diamond spin chain / O. Derzhko, J. Richter, and O. Krupnitska // *Condensed Matter Physics (L'viv)* – 2012. – Vol. 15, no. 4. – Pp. 43702-1-10.
18. *Derzhko, O.* Frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets at high magnetic fields: Beyond the flat-band scenario / O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, and T. Krokhmalskii // *Phys. Rev. B* – 2013. – Vol. 88, no. 9. – Pp. 094426-1-14.
19. *Derzhko, O.* The square-kagome quantum Heisenberg antiferromagnet at high magnetic fields: The localized-magnon paradigm and beyond / O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, and T. Krokhmalskii // *Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv)* – 2014. – Vol. 40, no. 6. – Pp. 662-670 [*Low Temperature Physics* – 2014. Vol. 40, no 6. – Pp. 513-520].
20. *Richter, J.* Frustrated diamond-chain quantum XXZ Heisenberg antiferromagnet in a magnetic field / J. Richter, O. Krupnitska, T. Krokhmalskii, and O. Derzhko // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2015. – Vol. 379. – Pp. 39-44.
21. *Крупницька, О.* Вплив анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга на процес намагнічення фрустрованого ромбічного ланцюжка у сильному магнітному полі // *Укр. фіз. журн.* – 2015 – Т. 60, № 12, – 1245-1252 с. [*Krupnitska, O.* Influence of the Heisenberg exchange interaction anisotropy on the magnetization process of a frustrated diamond chain in a strong magnetic field // *Ukr. J. Phys.* – 2015. – Vol. 60, no. 12. – Pp. 1243-1250.].
22. *Derzhko, O.* Effective low-energy description of almost Ising-Heisenberg diamond chain / O. Derzhko, O. Krupnitska, B. Lisnyi, and J. Strečka // *EPL*. – 2015. – Vol. 112. – Pp. 37002-6.
23. *Крупницька, О.* Вплив анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга на процес

- намагнічення фрустрованого ромбічного ланцюжка у сильному магнітному полі. – Львів: Ін-т фіз. конденс. систем НАН України, 2015. – (Препр. / НАН України. Ін-т фіз. конденс. систем; ICMP-15-03U).
24. *Krupnitska, O.* Localized-magnon chains and interchain interactions / O. Krupnitska, J. Richter, and O. Derzhko // Lviv, 2016. – (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-16-07E).
 25. *Крупницька, О.* Низькотемпературна термодинаміка ромбічного спінового ланцюжка у сильному магнітному полі // XII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 30 травня - 1 червня, 2012 р. Тези доповідей. – Львів: 2012. – С. 31.
 26. *Krupnitska, O.* High-field low-temperature properties of distorted diamond chain / O. Derzhko, J. Richter and O. Krupnitska // The 4-th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications”, Lviv, July 3-6, 2012. Book of Abstracts. – Lviv: 2012. – P. 131.
 27. *Крупницька, О.* Низькотемпературні властивості деформованого ромбічного спінового ланцюжка у сильному магнітному полі // “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики”, Тернопіль, 20-22 вересня 2012 р. Матеріали всеукраїнської наукової конференції. – Тернопіль: ТНТУ, 2012. – С. 150.
 28. *Крупницька, О.* Низькотемпературні властивості деяких фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга в сильних магнітних полях // XIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 5-7 червня, 2013 р. Тези доповідей. – Львів: 2013. – С. 43.
 29. *Krupnitska, O.* Low-temperature thermodynamics of some flat-band quantum antiferromagnets at high magnetic fields // V Young Scientists Conference

- “Problems of Theoretical Physics”, Kyiv, December 24-27, 2013. Book of Abstracts. – Kyiv: 2013. – P. 39.
30. *Крупницька, О.* Фрустрований ромбічний XXZ ланцюжок Гайзенберга у довільно орієнтованому зовнішньому магнітному полі // XIV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 4-6 червня, 2014 р. Тези доповідей. – Львів: 2014. – С. 37.
 31. *Крупницька, О.* Низькотемпературні властивості майже ідеально фрустрованої магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ у сильному магнітному полі // XV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 4-5 червня, 2015 р. Тези доповідей. – Львів: 2015. – С. 27.
 32. *Крупницька, О.* Локалізовані магнони в ромбічному ланцюжку і міжланцюжкові взаємодії // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 9-10 червня, 2016 р. Тези доповідей. – Львів: 2016. – С. 27.
 33. *Manousakis, E.* The spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on a square lattice and its application to the cuprous oxides / E. Manousakis // *Rev. Mod. Phys.* – 1991. – Vol. 63, no. 1. – Pp. 1-62.
 34. *Henelius, P.* Sign problem in Monte Carlo simulations of frustrated quantum spin systems / P. Henelius and A. W. Sandvik // *Phys. Rev. B* – 2000. – Vol. 62, no. 2. – Pp. 1102-1113.
 35. *Schmidt, R.* Frustration effects in magnetic molecules / R. Schmidt, J. Richter, and J. Schnack // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2005. – Vol. 295. – Pp. 164-167.
 36. *Derzhko, O.* Structural distortions of frustrated quantum spin lattices in high magnetic fields / O. Derzhko, J. Richter, and J. Schulenburg // *Physica Status Solidi (b)* – 2005. – Vol. 242, no. 15. – Pp. 3189–3194.
 37. *Derzhko, O.* Structural instability of two- and three-dimensional pyrochlore

- spin lattices in high magnetic fields / O. Derzhko and J. Richter // *Phys. Rev. B* – 2005. – Vol. 72, no. 9. – Pp. 094437-1-6.
38. *Derzhko, O.* Universal low-temperature behavior of frustrated quantum antiferromagnets in the vicinity of the saturation field / O. Derzhko and J. Richter // *Eur. Phys. J. B* – 2006. – Vol. 52. – Pp. 23-36.
 39. *Richter, J.* Finite-temperature order-disorder phase transition in a frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnet in strong magnetic fields / J. Richter, O. Derzhko, and T. Krokhmalskii // *Phys. Rev. B* – 2006. – Vol. 59, no. 14. – Pp. 1444301-5.
 40. *Schnack, J.* Exact eigenstates of highly frustrated spin lattices probed in high fields / J. Schnack, H.-J. Schmidt, A. Honecker, J. Schulenburg, and J. Richter // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2006. – Vol. 51. – Pp. 43–46.
 41. *Zhitomirsky, M. E.* High field properties of geometrically frustrated magnets / M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu // *Prog. Theor. Phys. Suppl.* – 2005. – Vol. 160. – Pp. 361-382.
 42. *Richter, J.* Localized-magnon states in strongly frustrated quantum spin lattices / J. Richter // *Fizika Nizkikh Temperatur* – 2005. – Vol. 32, no. 8-9. – Pp. 918-928.
 43. *Zhitomirsky, M. E.* Lattice gas description of pyrochlore and checkerboard antiferromagnets in a strong magnetic field / M. E. Zhitomirsky and H. Tsunetsugu // *Phys. Rev. B* – 2007. – Vol. 75, no. 22. – Pp. 224416-1-10.
 44. *Derzhko, O.* Universal properties of highly frustrated quantum magnets in strong magnetic fields / O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, and H.-J. Schmidt // *Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv)* – 2007. – Vol. 33, no. 9. – Pp. 982-996.
 45. *Derzhko, O.* Strongly correlated flat-band systems: The route from Heisenberg spins to Hubbard electrons / O. Derzhko, J. Richter, and M. Maksymenko // *Int. J. Mod. Phys. B* – 2015. – Vol. 29, no. 12. – Pp. 1530007-1-72.
 46. *Wu, C.* Flat bands and Wigner crystallization in the honeycomb optical lattice

- / C. Wu, D. Bergman, L. Balents, and S. Das Sarma // *Phys. Rev. Lett.* – 2007. – Vol. 99, no. 17. – Pp. 070401-1-4.
47. Wang, Y.-F. Fractional Quantum Hall Effect of Hard-Core Bosons in Topological Flat Bands / Y.-F. Wang, Z.-C. Gu, C.-D. Gong, and D. N. Sheng // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – Vol. 107, no. 14. – Pp. 146803-1-5.
 48. Sun, K. Nearly Flatbands with Nontrivial Topology / K. Sun, Z. Gu, H. Katsura, and S. Das Sarma // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – Vol. 106, no. 23. – Pp. 236803-1-4.
 49. Katsura, H. Ferromagnetism in the Hubbard model with topological/non-topological flat bands / H. Katsura, I. Maruyama, A. Tanaka, and H. Tasaki // *Europhys. Lett.* – 2010. – Vol. 91, no. 5. – Pp. 57007p-1-6.
 50. Tang, E. High-Temperature Fractional Quantum Hall States / E. Tang, J.-W. Mei, and X.-G. Wen // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – Vol. 106, no. 23. – Pp. 236802-1-4.
 51. Gulácsi, Z. Route to Ferromagnetism in Organic Polymers / Z. Gulácsi, A. Kampf, and D. Vollhardt // *Phys. Rev. Lett.* – 2010. – Vol. 105, no. 26. – Pp. 266403-1-4.
 52. Maksymenko, M. Flat-Band Ferromagnetism as a Pauli-Correlated Percolation Problem / M. Maksymenko, A. Honecker, R. Moessner, J. Richter, and O. Derzhko // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – Vol. 109, no. 9. – Pp. 096404-1-5.
 53. Fouet, J.-B. Condensation of magnons and spinons in a frustrated ladder / J.-B. Fouet, F. Mila, D. Clarke, H. Youk, O. Tchernyshyov, P. Fendley, and R. M. Noack // *Phys. Rev. B* – 2006. – Vol. 73, no. 21. – Pp. 214405-1-13.
 54. Picon, J.-D. Mechanisms for spin supersolidity in $S = \frac{1}{2}$ spin-dimer antiferromagnets / J.-D. Picon, A. F. Albuquerque, K. P. Schmidt, N. Laflorencie, M. Troyer, and F. Mila // *Phys. Rev. B* – 2008. – Vol. 78. – Pp. 184418-1-11.
 55. Honecker, A. Frustrated trimer chain model and $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ in a magnetic field / A. Honecker and A. Läuchli // *Phys. Rev. B* – 2001. – Vol.

- 63, no. 17. – Pp. 174407-1-9.
56. *Honecker, A.* Dynamic and thermodynamic properties of the generalised diamond chain model for azurite / A. Honecker, S. Hu, R. Peters, and J. Richter // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2011. – Vol. 23. – Pp. 164211-1-9.
 57. *Brenig, W.* Planar pyrochlore: A strong-coupling analysis / W. Brenig and A. Honecker // *Phys. Rev. B* – 2002. – Vol. 65, no. 14. – Pp. 140407-1-4.
 58. *Jeschke, H.* Multistep Approach to Microscopic Models for Frustrated Quantum Magnets: The Case of the Natural Mineral Azurite / H. Jeschke, I. Opahle, H. Kandpal, R. Valenti, H. Das, T. Saha-Dasgupta, O. Janson, H. Rosner, A. Brühl, B. Wolf, M. Lang, J. Richter, S. Hu, X. Wang, R. Peters, T. Pruschke, and A. Honecker // *Phys. Rev. Lett.* – 2011. – Vol. 106, no. 21. – Pp. 217201-1-5.
 59. *Kikuchi, H.* et al. Reply: / H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97, no. 8. – Pp. 089702-1.
 60. *Gibson, M. C. R.* Magnetoelastic and structural properties of azurite $\text{Cu}_3(\text{C}_3)_2(\text{OH})_2$ from neutron scattering and muon spin rotation / M. C. R. Gibson, K. C. Rule, A. U. B. Wolter, J.-U. Hoffmann, O. Prokhnenko, D. A. Tennant, S. Gerischer, M. Kraken, F. J. Litterst, S. Süllow, J. Schreuer, H. Luetkens, A. Brühl, B. Wolf, and M. Lang // *Phys. Rev. B* – 2010. – Vol. 81, no. 14. – Pp. 140406-1-4.
 61. *Rule, K. C.* Nature of the Spin Dynamics and 1/3 Magnetization Plateau in Azurite / K. C. Rule, A. U. B. Wolter, S. Süllow, D. A. Tennant, A. Brühl, S. Köhler, B. Wolf, M. Lang, and J. Schreuer // *Phys. Rev. Lett.* – 2008. – Vol. 100, no. 11. – Pp. 117202-1-4.
 62. *Rule, K. C.* Dynamics of azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ in a magnetic field as determined by neutron scattering / K. C. Rule, D. A. Tennant, J.-S. Caux, M. C. R. Gibson, M. T. F. Telling, S. Gerischer, S. Süllow, and M. Lang // *Phys.*

- Rev. B* – 2011. – Vol. 84, no. 18. – Pp. 104401-1-8.
63. *Cong, P. T.* Magnetoelastic couplings in the distorted diamond-chain compound azurite / P. T. Cong, B. Wolf, R. Sekhar Manna, U. Tutsch, M. de Souza, A. Brühl, and M. Lang // *Phys. Rev. B* – 2014. – Vol. 89, no. 17 – 1. – Pp. 174427-1-8.
 64. *Hagiya, Y.* Thermal Conductivity and Spin State of the Spin Diamond-Chain System Azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / Y. Hagiya, T. Kawamata, K. Naruse, M. Ohno, Y. Matsuoka, H. Sudo, H. Nagasawa, H. Kikuchi, T. Sasaki, and Y. Koike // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2016. – Vol. 85. – Pp. 034715-1-4.
 65. *Wu, J. C.* Thermal conductivity of the diamond-chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / J. C. Wu, J. D. Song, Z. Y. Zhao, J. Shi, H. S. Xu, J. Y. Zhao, X. G. Liu, X. Zhao, and X. F. Sun // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2016. – Vol. 28, no. 5. – Pp. 1-8.
 66. *Gu, B.* Comment on “Experimental Observation of the $\frac{1}{3}$ Magnetization Plateau in the Diamond-Chain Compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / B. Gu and G. Su // *Phys. Rev. Lett.* – 2006. – Vol. 97, no. 8. – P. 089701-1.
 67. *Gu, B.* Magnetism and thermodynamics of spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg diamond chains in a magnetic field / B. Gu and G. Su // *Phys. Rev. B* – 2007. – Vol. 75, no. 17. – Pp. 174437-1-16.
 68. *Ananikian, N.* Magnetic and quantum entanglement properties of the distorted diamond chain model for azurite / N. Ananikian, H. Lazaryan, and M. Nalbandyan // *Eur. Phys. J. B* – 2012. – Vol. 85. – Pp. 223.
 69. *Derzhko, O.* Emergent Ising degrees of freedom in frustrated two-leg ladder and bilayer $s = \frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnets / O. Derzhko, T. Krokhmal'skii, and J. Richter // *Phys. Rev. B* – 2010. – Vol. 82, no. 21. – Pp. 214412:1-14.
 70. *Gros, C.* The Transition from an Ordered Antiferromagnet to a Quantum Disordered Spin Liquid in a Solvable Bilayer Model / C. Gros, W. Wenzel, and J. Richter // *Europhys. Lett.* – 1995. – Vol. 32, no. 9. – Pp. 747-752.

71. *Lin, H.-Q.* Exact Ground States and Excited States of Net Spin Models / H.-Q. Lin and J. L. Shen // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2000. – Vol. 69, no. 3. – Pp. 878-882.
72. *Chen, P.* Field-induced spin supersolidity in frustrated $s = \frac{1}{2}$ spin-dimer models / P. Chen, C.-Y. Lai, and M.-F. Yang // *Phys. Rev. B* – 2010. – Vol. 81, no. 2. – Pp. 020409-1-4.
73. *Albuquerque, A. F.* Phase separation versus supersolid behavior in frustrated antiferromagnets / A. F. Albuquerque, N. Laflorencie, J.-D. Picon, and F. Mila // *Phys. Rev. B* – 2011. – Vol. 83, no. 17. – Pp. 174421-1-7.
74. *Murakami, Y.* Supersolid states in a spin system: Phase diagram and collective excitations / Y. Murakami, T. Oka, and H. Aoki // *Phys. Rev. B* – 2013. – Vol. 88, no. 22. – Pp. 224404-1-12.
75. *Keren, A.* Muon-spin-rotation measurements in the kagomé lattice systems: Cr-jarosite and Fe-jarosite // A. Keren, K. Kojima, L. P. Le, G. M. Luke, W. D. Wu, Y. J. Uemura, M. Takano, H. Dabkowska, and M. J. P. Gingras // *Phys. Rev. B* – 1996. – Vol. 53, no. 10. – Pp. 6451-6454.
76. *Wills, A. S.* Magnetic correlations in deuterium jarosite, a model $S = \frac{5}{2}$ Kagomé antiferromagnet / A. S. Wills, A. Harrison, S. A. M. Mentink, T. E. Mason, and Z. Tun // *Europhys. Lett.* – 1998. – Vol. 42, no. 3. – Pp. 325-330.
77. *Ramirez, A. P.* Entropy Balance and Evidence for Local Spin Singlets in a Kagomé-Like Magnet / A. P. Ramirez, B. Hessen, and M. Winklemann // *Phys. Rev. Lett.* – 2000. – Vol. 84, no. 13. – Pp. 2957-2960.
78. *Gardner, J. S.* Cooperative Paramagnetism in the Geometrically Frustrated Pyrochlore Antiferromagnet $\text{Tb}_2\text{Ti}_2\text{O}_7$ / J. S. Gardner, S. R. Dunsiger, B. D. Gaulin, M. J. P. Gingras, J. E. Greedan, R. F. Kiefl, M. D. Lumsden, W. A. MacFarlane, N. P. Raju, J. E. Sonier, I. Swainson, and Z. Tun // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – Vol. 82, no. 5. – Pp. 1012-1015.
79. *Huo, D.* Thermoelectric power of the superconducting pyrochlore $\text{Cd}_2\text{Re}_2\text{O}_7$ /

- D. Huo, A. Mitsuda, Y. Isikawa, J. Sakurai, H. Sakai, H. Ohno, M. Kato, K. Yoshimura, S. Kambe, and R. Walstedt // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2002. – Vol. 14, no. 12. – Pp. L257–L260.
80. *Mandrus, D.* Continuous metal-insulator transition in the pyrochlore $\text{Cd}_2\text{Os}_2\text{O}_7$ / D. Mandrus, J. R. Thompson, R. Gaal, L. Forro, J. C. Bryan, B. C. Chakoumakos, L. M. Woods, B. C. Sales, R. S. Fishman, and V. Keppens // *Phys. Rev. B* – 2001. – Vol. 63, no. 19. – Pp. 195104-1-12.
 81. *Koga, A.* Frustrated Heisenberg antiferromagnet on the pyrochlore lattice / A. Koga and N. Kawakami // *Phys. Rev. B* – 2001. – Vol. 63, no. 14. – Pp. 144432-1-5.
 82. *Takano, K.* Ground states with cluster structures in a frustrated Heisenberg chain / K. Takano, K. Kubo, and H. Sakamoto // *J. Phys.: Condens. Matter* – 1996. – Vol. 8, no. 35. – Pp. 227201-1-4.
 83. *Niggemann, H.* Mixed Heisenberg chains: I. The ground-state problem / H. Niggemann, G. Uimin, and J. Zittartz // *J. Phys.: Condens. Matter* – 1997. – Vol. 9, no. 42. – Pp. 9031–9042.
 84. *Niggemann, H.* Mixed Heisenberg chains: II. Thermodynamics / H. Niggemann, G. Uimin, and J. Zittartz // *J. Phys.: Condens. Matter* – 1998. – Vol. 10, no. 23. – Pp. 5217–5236.
 85. *Okamoto, K.* Magnetic properties of the $S = \frac{1}{2}$ distorted diamond chain at $T = 0$ / K. Okamoto, T. Tonegawa, and M. Kaburagi // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2003. – Vol. 15, no. 35. – Pp. 5979–5995.
 86. *Ivanov, N. B.* Competition between plaquette and dimer phases in Heisenberg chains / N. B. Ivanov and J. Richter // *Phys. Lett. A* – 1997. – Vol. 232. – Pp. 308-312.
 87. *Richter, J.* The antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$ chain with competing dimers and plaquettes: numerical versus exact results / J. Richter, N. B. Ivanov, and J. Schulenburg // *J. Phys.: Condens. Matter* – 1998. – Vol. 10, no. 16. – Pp.

3635–3649.

88. *Koga, A.* First-order quantum phase transition in the orthogonal-dimer spin chain / A. Koga, K. Okunishi, and N. Kawakami // *Phys. Rev. B* – 2000. – Vol. 62, no. 9. – Pp. 5558-5563.
89. *Schulenburg, J.* Sequence of first-order quantum phase transitions in a frustrated spin half dimer-plaquette chain / J. Schulenburg and J. Richter // *Phys. Rev. B* – 2002. – Vol. 66, no. 13. – Pp. 134419-1-6.
90. *Koga, A.* Frustration-induced phase transitions in the spin- S orthogonal-dimer chain // A. Koga and N. Kawakami // *Phys. Rev. B* – 2002. – Vol. 65, no. 21. – Pp. 214415-1-5.
91. *Manmana, S. R.* Unconventional magnetization plateaus in a Shastry-Sutherland spin tube / S. R. Manmana, J.-D. Picon, K. P. Schmidt, and F. Mila // *Europhys. Lett.* – 2011. – Vol. 94, no. 6. – Pp. 67004p-1-6.
92. *Ohanyan, V.* Magnetothermal properties of the Heisenberg-Ising orthogonal-dimer chain with triangular XXZ clusters / V. Ohanyan and A. Honecker // *Phys. Rev. B* – 2012. – Vol. 86, no. 5. – Pp. 054412-1-17.
93. *Paulinelli, H. G.* Thermal entanglement in an orthogonal dimer-plaquette chain with alternating Ising–Heisenberg coupling / H. G. Paulinelli, S. de Souza, and O. Rojas // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2013. – Vol. 25, no. 30. – id 306003.
94. *Schulenburg, J.* Infinite series of magnetization plateaus in the frustrated dimer-plaquette chain / J. Schulenburg and J. Richter // *Phys. Rev. B* – 2002. – Vol. 65, no. 5. – Pp. 054420-1-3.
95. *Siddharthan, R.* Square kagome quantum antiferromagnet and the eight-vertex model / R. Siddharthan and A. Georges // *Phys. Rev. B* – 2002. – Vol. 65, 014417.
96. *Tomczak P.* Specific heat of the spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnet on squagome lattice / P. Tomczak and J. Richter // *J. Phys. A* – 2003. – Vol.

- 36, no. 20. – Pp. 5399–5403.
97. *Richter, J.* The Heisenberg antiferromagnet on the square-kagome lattice / J. Richter, J. Schulenburg, P. Tomczak, and D. Schmalfuß // *Cond. Matt. Phys.* – 2009. – Vol. 12, no. 3, – Pp. 507–517.
 98. *Rousochatzakis, I.* Frustrated magnetism and resonating valence bond physics in two-dimensional kagome-like magnets / I. Rousochatzakis, R. Moessner, and J. van den Brink // *Phys. Rev. B* – 2013. – Vol. 88, no. 19. – Pp. 195109-1-11.
 99. *Schmidt, H.-J.* Linear independence of localized magnon states / H.-J. Schmidt, J. Richter, and R. Moessner // *J. Phys. A.* – 2006. – Vol. 39, no. 34. – Pp. 10673–10690.
 100. *Боголюбов, М. М.* Лекції з квантової статистики, – Київ (Рад. школа, 1949).
 101. *Klein, D. J.* Degenerate perturbation theory / D. J. Klein // *J. Chem. Phys.* – 1974. – Vol. 61, no. 3. – Pp. 786-798.
 102. *Fulde, P.* Electron Correlations in Molecules and Solids (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 1993), p. 77.
 103. *Essler, F. H. L.* The One-Dimensional Hubbard Model / F. H. L. Essler, H. Frahm, F. Göhmann, A. Klümper, and V. E. Korepin // (Cambridge University Press, Cambridge, UK, 2005), p. 38.
 104. *Mila, F.* Chap. 20 in Introduction to Frustrated Magnetism, edited by C. Lacroix, P. Mendels, and F. Mila / F. Mila and K. P. Schmidt // (Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg, 2011), arXiv:1005.2495.
 105. *Lieb, E.* Two soluble models of an antiferromagnetic chain / E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis // *Ann. Phys. (N.Y.)* – 1961. – Vol. 16, no. 3. – Pp. 407-466.
 106. *Katsura, S.* Statistical Mechanics of the Anisotropic Linear Heisenberg Model / S. Katsura // *Phys. Rev.* – 1962. – Vol. 127, no. 8. – Pp. 1508-1518.
 107. *Изюмов, Ю. А.* Статистическая механика магнитоупорядоченных систем / Ю. А. Изюмов, Скрыбин Ю. Н. // – М.: Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит., 1987.— 264 с.

108. *A. F. Albuquerque et al.* (ALPS collaboration), *J. Magn. Magn. Mater.* **310**, 1187 (2007); *B. Bauer et al.* (ALPS collaboration), *J. Stat. Mech.* P05001 (2011).
109. *Trippe, C.* Exact calculation of the magnetocaloric effect in the spin- $\frac{1}{2}$ XXZ chain / *C. Trippe, A. Honecker, A. Klümper, and V. Ohanyan* // *Phys. Rev. B* – 2010. – Vol. 81, no. 5. – Pp. 054402-1-10.
110. *Tarasenko, R.* Experimental Study of the Magnetocaloric Effect in the Two-Dimensional Quantum System $\text{Cu(en)(H}_2\text{O)}_2\text{SO}_4$ (en=ethylenediamine= $\text{C}_2\text{N}_2\text{H}_8$) / *R. Tarasenko, L. Sedláková, A. Orendáčová, M. Orendáč, and A. Feher* // *Journal of Physics: Conference Series* – 2012. – Vol. 400, 032100.
111. *Midya, A.* Giant magnetocaloric effect in magnetically frustrated EuHo_2O_4 and EuDy_2O_4 compounds // *A. Midya, N. Khan, D. Bhoi, and P. Mandal* // *Appl. Phys. Lett.* – 2012. – Vol. 101. – Pp. 132415-1-4.
112. *Lang, M.* Field-induced quantum criticality – application to magnetic cooling / *M. Lang, B. Wolf, A. Honecker, L. Balents, U. Tutsch, P. T. Cong, G. Hofmann, N. Kruger, F. Ritter, W. Assmus, and A. Prokofiev* // *Phys. Status Solidi B* – 2013. – Vol. 250, no. 3. – Pp. 457–463.
113. *Ding, H.-Q.* Kosterlitz-Thouless transition in the two-dimensional quantum XY model / *H.-Q. Ding and M. S. Makivić* // *Phys. Rev. B* – 1990. – Vol. 42, no. 10. – Pp. 6827-6830.
114. *Ding, H.-Q.* Phase transition and thermodynamics of quantum XY model in two dimensions / *H.-Q. Ding* // *Phys. Rev. B* – 1992. – Vol. 45, no. 1. – Pp. 230-242.
115. *Ding, H.-Q.* Could in-plane exchange anisotropy induce the observed anti-ferromagnetic transitions in the undoped high- T_c materials? / *H.-Q. Ding* // *Phys. Rev. Lett.* – 1992. – Vol. 68, no. 12. – Pp. 1927-1930.
116. *Cuccoli, A.* Quantum effects on the Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition

- in the ferromagnetic two-dimensional XXZ model / A. Cuccoli, V. Tognetti, P. Verrucchi, and R. Vaia // *Phys. Rev. B* – 1995. – Vol. 51, no. 18. – Pp. 12840-12843.
117. *Capriotti, L.* Quantum Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transition in square-lattice magnets with easy-plane anisotropy / L. Capriotti, A. Cuccoli, V. Tognetti, R. Vaia, and P. Verrucchi // *Physica D* – 1998. – Vol. 119, no. 1. – Pp. 68-72.
 118. *Cuccoli, A.* Quantum Monte Carlo study of $S = \frac{1}{2}$ weakly anisotropic anti-ferromagnets on the square lattice / A. Cuccoli, T. Roscilde, V. Tognetti, R. Vaia, and P. Verrucchi // *Phys. Rev. B* – 2003. – Vol. 67, no. 10. – Pp. 104414:1-18.
 119. *Pázmándi, F.* Quantum Phase Transitions in XY Spin Models / F. Pázmándi and Z. Domański // *Phys. Rev. Lett.* – 1995. – Vol. 74, no. 12. – Pp. 2363-2366.
 120. *Harada, K.* Universal jump in the helicity modulus of the two-dimensional quantum XY model / K. Harada and N. Kawashima // *Phys. Rev. B* – 1997. – Vol. 55, no. 18. – Pp. R11 949-952.
 121. *Harada, K.* Kosterlitz-Thouless Transition of Quantum XY Model in Two Dimensions / K. Harada and N. Kawashima // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 1998. – Vol. 67, no. 8. – Pp. 2768-2776.
 122. *Sandvik, A. W.* Ground-state parameters, finite-size scaling, and low-temperature properties of the two-dimensional $S = \frac{1}{2}$ XY model / A. W. Sandvik and C. J. Hamer // *Phys. Rev. B* – 1999. – Vol. 60, no. 9. – Pp. 6588-6593.
 123. *Bernardet, K.* Analytical and numerical study of hardcore bosons in two dimensions / K. Bernardet, G. G. Batrouni, J.-L. Meunier, G. Schmid, M. Troyer, and A. Dorneich // *Phys. Rev. B* – 2002. – Vol. 65, no. 10. – Pp. 104519-1-10.
 124. *Hébert, F.* Quantum phase transitions in the two-dimensional hardcore boson model / F. Hébert, G. G. Batrouni, R. T. Scalettar, G. Schmid, M. Troyer,

- and A. Dorneich // *Phys. Rev. B* – 2001. – Vol. 65, no. 1. – Pp. 014513-1-9.
125. *Schmid, G.* Finite-Temperature Phase Diagram of Hard-Core Bosons in Two Dimensions / G. Schmid, S. Todo, M. Troyer, and A. Dorneich // *Phys. Rev. Lett.* – 2002. – Vol. 88, no. 16. – Pp. 167208-1-4.
 126. *Carrasquilla, J.* Superfluid to normal phase transition in strongly correlated bosons in two and three dimensions / J. Carrasquilla and M. Rigol // *Phys. Rev. A* – 2012. – Vol. 86, no. 4. – Pp. 043629-1-12.
 127. *Ceccarelli, G.* Universal behavior of two-dimensional bosonic gases at Berezinskii-Kosterlitz-Thouless transitions / G. Ceccarelli, J. Nespolo, A. Peli-ssetto, and E. Vicari // *Phys. Rev. B* – 2013. – Vol. 88, no. 2. – Pp. 024517-1-15.
 128. *Berezinskii, V. L.* Destruction of long-range order in one-dimensional and two-dimensional systems having a continuous group I. Classical systems / V. L. Berezinskii // *Zh. Eksp. Teor. Fiz.* – 1970. – Vol. 59, – Pp. 907-920. [Sov. Phys. JETP – 1970. – Vol. 32, no. 3 – Pp. 493-500]
 129. *Kosterlitz, J. M.* Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems / J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless // *J. Phys. C* – 1973. – Vol. 6, no. 7 – Pp. 1181-1203.
 130. *Gupta, R.* Phase Transition in the 2D XY Model / R. Gupta, J. DeLapp, G. G. Batrouni, G. C. Fox, C. F. Baillie, and J. Apostolakis // *Phys. Rev. Lett.* – 1988. – Vol. 61, no. 17. – Pp. 1996-1999.
 131. *Gupta, R.* Critical behavior of the two-dimensional XY model / R. Gupta and C. F. Baillie // *Phys. Rev. B* – 1992. – Vol. 45, no. 6. – Pp. 2883-2898 .
 132. *Hasenbusch, M.* Computing the roughening transition of Ising and solid-on-solid models by BCSOS model matching / M. Hasenbusch and K. Pinn // *J. Phys. A* – 1997. – Vol. 30, no. 1. – Pp. 63–80.
 133. *Hasenbusch, M.* The two-dimensional XY model at the transition temperature: a high-precision Monte Carlo study / M. Hasenbusch // *J. Phys. A* – 2005. – Vol. 38, no. 26. – Pp. 5869–5883.

134. *Komura, Y.* Large-Scale Monte Carlo Simulation of Two-Dimensional Classical XY Model Using Multiple GPUs / Y. Komura and Y. Okabe // *J. Phys. Soc. Jpn.* – 2012. – Vol. 81, no. 11. – Pp.113001-1-4.
135. *Hsieh, Y.-D.* Finite-size scaling method for the Berezinskii–Kosterlitz–Thouless transition / Y.-D. Hsieh, Y.-J. Kao, and A. W. Sandvik // *J. Stat. Mech.* – 2013. – Vol. 2013, P09001.
136. *R. J. Baxter*, Exactly Solved Models in Statistical Mechanics (Academic Press, London, 1982).
137. *D. C. Mattis*, *The Many-Body Problem: An Encyclopedia of Exactly Solved Models in One Dimension* (World Scientific, Singapore, 1993).
138. *Strečka, J.* A brief account of the Ising and Ising-like models: Mean-field, effective-field and exact results / J. Strečka, M. Jaščur // *Acta Physica Slovaca* – 2015. – Vol. 65, no. 4, – Pp. 235-367.
139. *Syozii, I.* Statistics of Kagome Lattice / I. Syozii // *Prog. Theor. Phys.* – 1951. – Vol. 6, no. 3. – Pp. 306-308.
140. *Fisher, M. E.* Transformations of Ising Models / M. E. Fisher // *Phys. Rev.* – 1959. – Vol. 113, no. 4. – Pp. 969-981.
141. *Strečka, J.* Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical–quantum models / J. Strečka // *Phys. Lett. A* – 2010. – Vol. 374, no. 36. – Pp. 3718-3722.
142. *J. Strečka*, *On the Theory of Generalized Algebraic Transformations* (LAP LAMBERT Academic Publishing, Saarbrücken, 2010) [arXiv:1008.2071].
143. *Van den Heuvel, W.* Dysprosium-based experimental representatives of an Ising-Heisenberg chain and a decorated Ising ring / W. Van den Heuvel and L. F. Chibotaru // *Phys. Rev. B* – 2010. – Vol. 82, – no. 17. – Pp. 174436-1-14.
144. *Čanová, L.* Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising–Heisenberg diamond chains / L. Čanová, J. Strečka, and M. Jaščur // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2006. – Vol. 18. – Pp. 4967-4984.

145. Čanová, L. Exact solution of the mixed spin-1/2 and spin-S Ising-Heisenberg diamond chain / L. Čanová, J. Strečka, and T. Lučivjanský // *Condensed Matter Physics (L'viv)* – 2009. – Vol. 12. – Pp. 353-368.
146. Lisnii, B. Spin- $\frac{1}{2}$ asymmetric diamond Ising-Heisenberg chain / B. Lisnyi // *Ukr. J. Phys* – 2011. – Vol. 56, no. 11. – Pp. 1237-1245 (2011) [*Лісний Б. Спін- $\frac{1}{2}$ асиметричний ромбічний ланцюжок Ізинга–Гайзенберга* // *Укр. Фіз. Журн.* – 2011. – Т. 56, № 11, С. 1238-1246.].
147. Lisnii, B. Exact results for a generalized spin-1/2 Ising–Heisenberg diamond chain with the second-neighbor interaction between nodal spins / B. Lisnyi and J. Strečka // *Phys. Status Solidi B* – 2014. – Vol. 251, no. 5. – Pp. 1083–1095.
148. Wolff-Fabris, F. Magnetostriction and thermal expansion on 1D quantum spin system azurite / F. Wolff-Fabris, S. Francoual, V. Zapf, M. Jaime, B. Scott, S. Tozer, S. Hannahs, T. Murphy and A. Lacerda // *J. Phys.: Conf. Ser.* – 2009. – Vol. 150, 042030.
149. Kang, J. Consequences of the intrachain dimer–monomer spin frustration and the interchain dimer–monomer spin exchange in the diamond-chain compound azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / J. Kang, C. Lee, R. K. Kremer, and M.-H. Whangbo // *J. Phys.: Condens. Matter* – 2009. – Vol. 21. – Pp. 392201-1-5.

ДОДАТКИ

Д.1. Теорія збурень

Приведемо тут основні положення операторної теорії збурень [102]. Нехай гамільтоніан H можна розділити на

$$H = H_0 + \lambda H_1, \quad \lambda = 1$$

так, що H_0 можна діагоналізувати, тобто

$$H_0|\psi_i\rangle = E_i|\psi_i\rangle, \quad i = 1, 2, \dots$$

Нехай власні значення E_i і власні функції ψ_i є доволі близькими до невідомих власних значень і власних функцій $\mathcal{E}_i$ і $|\Phi_i\rangle$ гамільтоніана H , тобто

$$H|\Phi_i\rangle = \mathcal{E}_i|\Phi_i\rangle.$$

Розділимо весь гільбертовий простір $\mathcal{H}$ на модельний простір $\mathcal{H}_0$ і на решту простору $\mathcal{H} \setminus \mathcal{H}_0$. Позначимо P оператор проектування на модельний простір, для якого виконується рівність $P^2 = P$. Введемо також оператор проектування на решту простору $Q = 1 - P$. Очевидно, що

$$\begin{cases} PH|\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 P|\Phi_0\rangle, \\ QH|\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 Q|\Phi_0\rangle, \end{cases} \quad (\text{Д.1})$$

$$\begin{cases} RHP|\Phi_0\rangle + RHQ|\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 P|\Phi_0\rangle, \\ QHP|\Phi_0\rangle + QHQ|\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 Q|\Phi_0\rangle. \end{cases} \quad (\text{Д.2})$$

Виключимо $Q|\Phi_0\rangle$ з рівняння (Д.2)

$$Q|\Phi_0\rangle = \frac{1}{\mathcal{E}_0 - QH} QHP|\Phi_0\rangle.$$

Тепер можемо отримати ефективний гамільтоніан H_{eff} , який діє тільки на модельний простір $\mathcal{H}_0$, але дає точну енергію основного стану $\mathcal{E}_0$. Маємо:

$$H_{\text{eff}} = PHP + PHQ \frac{1}{\mathcal{E}_0 - QHQ} QHP + \dots,$$

$$H_{\text{eff}} P |\Phi_0\rangle = \mathcal{E}_0 P |\Phi_0\rangle.$$

Перепозначимо вихідний гамільтоніан як $H = H_{\text{main}} + V$. Підставимо

$$A = \varepsilon_0 - QH_0Q,$$

$$B = QH_1Q - (\mathcal{E}_0 - \varepsilon_0)$$

в наступну рівність, яка виконується для довільних операторів A і B :

$$\frac{1}{A - B} = \frac{1}{A} \sum_{n=0}^{\infty} \left(B \frac{1}{A} \right)^n = \frac{1}{A} + \frac{1}{A} B \frac{1}{A} + \frac{1}{A} B \frac{1}{A} B \frac{1}{A} + \dots$$

Отримаємо:

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= PHP + PHQ \frac{1}{\varepsilon_0 - QH_{\text{main}}Q} QHP + \dots \\ &= PHP + PVQ \frac{1}{\varepsilon_0 - QH_{\text{main}}Q} QVP + \dots \end{aligned}$$

Підставивши $Q = 1 - P = \sum_{\alpha \neq 0} |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|$, маємо

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} &= PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \sum_{\beta \neq 0} |\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha| \frac{1}{\varepsilon_0 - QH_{\text{main}}Q} |\varphi_\beta\rangle \langle \varphi_\beta| VP + \dots \\ &= PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots \quad (\text{Д.3}) \end{aligned}$$

Цим виразом (ліва сторона у рівнянні (Д.3)) для ефективного гамільтоніана H_{eff} будемо користуватися у розділах 3 – 6.

Д.2. Ефективні гамільтоніани для фрустрованого димер-плакетного спінового ланцюжка

Д.2.1. Наближення сильного зв'язку. Початковий гамільтоніан для димер-плакетного ланцюжка має вигляд:

$$H = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} (J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} + J_3 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_4 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m,4} + J_1 \mathbf{s}_{m,4} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} + J_3 \mathbf{s}_{m,4} \cdot \mathbf{s}_{m+1,2} - h (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z + s_{m,4}^z)) . \quad (\text{Д.4})$$

Розділяємо початковий гамільтоніан на основну частину і "збурення" $H = H_{\text{main}} + V$, де

$$\begin{aligned} H_{\text{main}} &= J_2 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,2} - J_2 (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z) + s_{m,4}^z, \\ V &= J_3 \mathbf{s}_{m,1} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,2} \cdot \mathbf{s}_{m,3} + J_1 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,1} + J_3 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m+1,3} \\ &\quad - (h - h_0) (s_{m,1}^z + s_{m,2}^z + s_{m,3}^z) . \end{aligned} \quad (\text{Д.5})$$

Оператор проектування для димер-плакетного ланцюжка:

$$\begin{aligned} P &= |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| = \otimes_m P_m, \\ P_{\mathbf{m}} &= (|t_1\rangle\langle t_1| + |s\rangle\langle s|) |\uparrow_3\rangle\langle\uparrow_3| |\uparrow_4\rangle\langle\uparrow_4| |_m . \end{aligned} \quad (\text{Д.6})$$

Основна частина гамільтоніана:

$$P H_{\text{main}} P = P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left(-\frac{1}{4} J_2 - (h - J_2) T_m^z \right) P. \quad (\text{Д.7})$$

Крім того,

$$P V P = P \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left(\frac{J_1 + J_3}{4} + \frac{J_4}{4} - h + J_2 + \left(\frac{J_1 + J_3}{2} - h + J_2 \right) T_m^z \right) . \quad (\text{Д.8})$$

Об'єднуючи рівняння (Д.6) і (Д.7), маємо

$$\begin{aligned} P H P &= P \sum_m \left(-\frac{J_2}{2} - h + \frac{J}{2} + \frac{J}{2} - (h - h_1) T_m^z \right) P, \\ h_1 &= 2J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \end{aligned} \quad (\text{Д.9})$$

Оскільки розглядаються два класи збуджених станів (див. с. 42), то

$$\begin{aligned}
 & PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP = \\
 & = -\frac{P}{J_2 - J_4} \sum_{\alpha \neq 0} \left(\left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^- + s_{m+1,2}^-) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^- + s_{m+1,1}^-) \right) P \right. \\
 & \quad \times P \left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^+ + s_{m+1,2}^+) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^+ + s_{m+1,1}^+) \right) \left. \right) P \\
 & \quad - \frac{P}{J_2} \sum_{\alpha \neq 0} \left(\left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^- + s_{m+1,2}^-) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^- + s_{m+1,1}^-) \right) P \right. \\
 & \quad \times P \left(\frac{J_3}{2} (s_{m,1}^+ + s_{m+1,2}^+) + \frac{J_1}{2} (s_{m,2}^+ + s_{m+1,1}^+) \right) \left. \right) P. \quad (Д.10)
 \end{aligned}$$

Врахувавши, що

$$\begin{aligned}
 Ps_1^- P &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |s\rangle\langle t_1| = -\frac{1}{\sqrt{2}} T^-, \quad Ps_2^- P = \frac{1}{\sqrt{2}} |s\rangle\langle t_1| = \frac{1}{\sqrt{2}} T^-, \\
 Ps_1^+ P &= -\frac{1}{\sqrt{2}} |t_1\rangle\langle s| = -\frac{1}{\sqrt{2}} T^+, \quad Ps_2^+ P = \frac{1}{\sqrt{2}} |t_1\rangle\langle s| = \frac{1}{\sqrt{2}} T^+, \quad (Д.11)
 \end{aligned}$$

отримуємо спін- $\frac{1}{2}$ ізотропну XY модель в поперечному полі:

$$H_{\text{eff}} = P \sum_m (\mathcal{C} - \mathfrak{h} T_m^z - J (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y)) P$$

де

$$\begin{aligned}
 J &= -\frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} \frac{J_4}{J_2}, \\
 \mathfrak{h} &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8(J_2 - J_4)} \frac{2J_2 - J_4}{J_2}, \\
 \mathcal{C} &= -\frac{3}{2}h - \frac{J_2}{4} + \frac{J_4}{4} + \frac{J}{2} - \frac{(J_1 - J_3)^2}{16(J_2 - J_4)} \frac{2J_2 - J_4}{J_2}, \\
 h_1 &= J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \quad (Д.12)
 \end{aligned}$$

Д.2.2. Підхід локалізованих магнів. Для димер-плакетного ланцюжка гамільтоніан $\mathcal{H}$ записується наступним чином:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} & \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} - (h - J_2) T_m^z - \left(h - \frac{J}{2} \right) (s_{m,3}^z + s_{m,4}^z) \right. \\ & + \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (T_m^x s_{m,3}^x + T_m^y s_{m,3}^y) + J T_m^z s_{m,3}^z + J_4 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m,4} \\ & \left. - \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (s_{m,4}^x T_{m+1}^x + s_{m,4}^y T_{m+1}^y) + J s_{m,4}^z T_{m+1}^z \right), \\ & J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \end{aligned} \quad (\text{Д.13})$$

Основна частина гамільтоніана $\mathcal{H}$ є такою:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{main}} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} & \left(-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} - (h - J_2) T_m^z - \left(h - \frac{J}{2} \right) (s_{m,3}^z + s_{m,4}^z) \right. \\ & \left. + J T_m^z s_{m,3}^z + J_4 \mathbf{s}_{m,3} \cdot \mathbf{s}_{m,4} + J s_{m,4}^z T_{m+1}^z \right). \end{aligned} \quad (\text{Д.14})$$

Решта гамільтоніана є збуренням

$$\mathcal{V} = \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (T_m^x s_{m,3}^x + T_m^y s_{m,3}^y) - \frac{J_1 - J_3}{\sqrt{2}} (s_{m,4}^x T_{m+1}^x + s_{m,4}^y T_{m+1}^y). \quad (\text{Д.15})$$

Розглядаємо наступні збуджені стани з відповідними енергіями:

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|u\rangle|s\rangle)_m (|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle &= \\ &= (\varepsilon_0 + J_2 - J_4) | \dots (|u\rangle|s\rangle)_m (|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle \\ \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|u\rangle|t\rangle)_m (|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle &= \\ &= (\varepsilon_0 + J_2) | \dots (|u\rangle|t\rangle)_m (|u\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle \\ \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|d\rangle|s\rangle)_m (|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle &= \\ &= (\varepsilon_0 + J_2 - J_4 + J) | \dots (|d\rangle|s\rangle)_m (|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|d\rangle|t\rangle)_m (|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle &= \\ &= (\varepsilon_0 + J_2 + J) | \dots (|d\rangle|t\rangle)_m (|d\rangle|\uparrow_3\uparrow_4\rangle)_{m+1} \dots \rangle, \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|u\rangle |s_{ud}\rangle)_m (|d\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle \\
& = \left(\varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 - \sqrt{J_4^2 + J^2/2} \right) | \dots (|u\rangle |s_{ud}\rangle)_m (|d\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle, \\
& x = (J_4 - \sqrt{J_4^2 + J^2})/J, \\
& |s_{ud}\rangle = (|s\rangle + x|t\rangle) / \sqrt{1+x^2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|u\rangle |t_{ud}\rangle)_m (|d\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle \\
& = \left(\varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 + \sqrt{J_4^2 + J^2/2} \right) | \dots (|u\rangle |t_{ud}\rangle)_m (|d\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle, \\
& |t_{ud}\rangle = (-x|s\rangle + |t\rangle) / \sqrt{1+x^2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|d\rangle |s_{du}\rangle)_m (|u\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle \\
& = \left(\varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 - \sqrt{J_4^2 + J^2/2} \right) | \dots (|d\rangle |s_{du}\rangle)_m (|u\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle, \\
& |s_{du}\rangle = (|s\rangle - x|t\rangle) / \sqrt{1+x^2},
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \mathcal{H}_{\text{main}} | \dots (|d\rangle |t_{du}\rangle)_m (|u\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle \\
& = \left(\varepsilon_0 + J_2 + J/2 - J_4/2 + \sqrt{J_4^2 + J^2/2} \right) | \dots (|d\rangle |t_{du}\rangle)_m (|u\rangle | \uparrow_3 \uparrow_4 \rangle)_{m+1} \dots \rangle, \\
& |t_{du}\rangle = (x|s\rangle + |t\rangle) / \sqrt{1+x^2}.
\end{aligned}$$

Знаючи всі збуджені стани, можемо отримати наступний вираз для другого доданку рівняння (3.6):

$$\begin{aligned}
& P \mathcal{V} \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} \mathcal{V} P = P \left(-\frac{(J_1 - J_3)^2}{8} \right) \\
& \times \sum_m \left(\frac{1}{J_2 - J_4} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} + T_m^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m+1}^z \right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \right. \\
& \left. + \left(\frac{1}{J_2} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} + T_m^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m+1}^z \right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \right) \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{\langle s_{ud}|s_{ud}\rangle}{J_2 + J/2 - J_4/2 - \sqrt{J_4^2 + J^2}/2} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} + T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} - T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\
& + \frac{\langle t_{ud}|t_{ud}\rangle}{J_2 + J/2 - J_4/2 + \sqrt{J_4^2 + J^2}/2} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} + T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} - T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\
& + \frac{\langle s_{du}|s_{du}\rangle}{J_2 + J/2 - J_4/2 - \sqrt{J_4^2 + J^2}/2} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} - T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} + T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\
& + \frac{\langle t_{du}|t_{du}\rangle}{J_2 + J/2 - J_4/2 + \sqrt{J_4^2 + J^2}/2} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} - T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} + T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\
& + \frac{1}{J_2 + J - J_4} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} - T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} - T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) \\
& + \frac{1}{J_2 + J} (T_m^- + T_{m+1}^-) \left(\frac{1}{2} - T_m^z\right) \left(\frac{1}{2} - T_{m+1}^z\right) (T_m^+ + T_{m+1}^+) P.
\end{aligned} \tag{Д.16}$$

Після нескладних перетворень отримаємо ефективний гамільтоніан (3.30) з константами (3.34).

Д.3. Ефективні гамільтоніани для ґратки квадратне кагоме

Д.3.1. Наближення сильного зв'язку. Розглядаємо стани

$$\begin{aligned}
|u\rangle &= |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, \\
|d\rangle &= \frac{1}{2} (|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle).
\end{aligned} \tag{Д.17}$$

Гамільтоніан H розбиваємо на "основну частину" H_{main} і на "збурення" V , $H = H_{\text{main}} + V$:

$$\begin{aligned}
H_{\text{main}} &= \sum_{\mathbf{m}} h_{\mathbf{m}}, \\
h_{\mathbf{m}} &= J_2 (\mathbf{s}_{m_x, m_y, 1} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 2} + \mathbf{s}_{m_x, m_y, 2} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 3} + \mathbf{s}_{m_x, m_y, 3} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 4} + \\
& \mathbf{s}_{m_x, m_y, 4} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 1}) - h_0 \left(s_{m_x, m_y, 1}^z + s_{m_x, m_y, 2}^z + s_{m_x, m_y, 3}^z \right. \\
& \left. + s_{m_x, m_y, 4}^z + s_{m_x, m_y, 5}^z + s_{m_x, m_y, 6}^z \right),
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
V &= \sum_{\mathbf{m}} v_{\mathbf{m}}, \\
v_{\mathbf{m}} &= J_3 \left(\mathbf{s}_{m_x, m_y, 1} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 5} + \mathbf{s}_{m_x, m_y, 5} \cdot \mathbf{s}_{m_x+1, m_y, 3} \right) \\
&+ J_1 \left(\mathbf{s}_{m_x, m_y, 2} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 5} + \mathbf{s}_{m_x, m_y, 5} \cdot \mathbf{s}_{m_x+1, m_y, 4} \right) \\
&+ J_3 \left(\mathbf{s}_{m_x, m_y, 2} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 6} + \mathbf{s}_{m_x, m_y, 6} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y+1, 4} \right) \\
&+ J_1 \left(\mathbf{s}_{m_x, m_y, 3} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y, 6} + \mathbf{s}_{m_x, m_y, 6} \cdot \mathbf{s}_{m_x, m_y+1, 1} \right) \\
&- (h - h_0) \left(s_{m_x, m_y, 1}^z + s_{m_x, m_y, 2}^z + s_{m_x, m_y, 3}^z + s_{m_x, m_y, 4}^z + s_{m_x, m_y, 5}^z + s_{m_x, m_y, 6}^z \right).
\end{aligned} \tag{Д.18}$$

Основний стан $H_{\text{main}} \in 2^{\mathcal{N}}$ -кратно вироджених:

$$|\varphi_0\rangle = \prod_{\mathbf{m}} (|s\rangle |\uparrow_5\rangle |\uparrow_6\rangle)_{\mathbf{m}}. \tag{Д.19}$$

Енергія основного стану $\in \varepsilon_0 = -5J_2\mathcal{N}$. Оператор проектування має вигляд:

$$\begin{aligned}
P &= |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0| = \otimes_{\mathbf{m}} P_{\mathbf{m}}, \\
P_{\mathbf{m}} &= (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|) \otimes |\uparrow_5\rangle\langle\uparrow_5| \otimes |\uparrow_6\rangle\langle\uparrow_6|)_{\mathbf{m}}.
\end{aligned} \tag{Д.20}$$

Ефективний гамільтоніан шукаємо з формули (3.6). Оскільки $PHP = PH_{\text{main}}P + PVP$ і

$$\begin{aligned}
h_{\mathbf{m}}|u\rangle_{\mathbf{m}} &= (J_2 - 3h_0)|u\rangle_{\mathbf{m}}, \\
h_{\mathbf{m}}|d\rangle_{\mathbf{m}} &= (-J_2 - 2h_0)|d\rangle_{\mathbf{m}},
\end{aligned} \tag{Д.21}$$

то

$$\begin{aligned}
PH_{\text{main}}P &= P \sum_{\mathbf{m}} ((J_2 - 3h_0)|u\rangle\langle u| + (-J_2 - 2h_0)|d\rangle\langle d|)_{\mathbf{m}} P \\
&= P \sum_{\mathbf{m}} \left(-\frac{5}{2}h_0 - (h_0 - 2J_2)T_{\mathbf{m}}^z \right) P.
\end{aligned} \tag{Д.22}$$

Крім того

$$PVP = P \sum_{\mathbf{m}} \left(\frac{3}{4}(J_1 + J_3) - \frac{5}{2}(h - h_0) - \left(h - h_0 - \frac{J_1 + J_3}{2} \right) T_{\mathbf{m}}^z \right) P. \tag{Д.23}$$

Отже,

$$PHP = P \sum_{\mathbf{m}} \left(\frac{3}{2}J - \frac{5}{2}h - (h - h_1) T_{\mathbf{m}}^z \right) P, \\ h_1 = 2J_2 + J, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}. \quad (\text{Д.24})$$

Розглянемо тепер другий доданок у рівнянні (3.6). Маємо таке:

$$PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\alpha}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha}} VP \\ = \frac{1}{-2J_2} \sum_{\mathbf{m}} \left(P \left(\frac{J_3}{2} s_{m_x, m_y, 1}^- + \frac{J_3}{2} s_{m_x+1, m_y, 3}^- + \frac{J_1}{2} s_{m_x, m_y, 2}^- + \frac{J_1}{2} s_{m_x+1, m_y, 4}^- \right) P \right. \\ \times P \left(\frac{J_3}{2} s_{m_x, m_y, 1}^+ + \frac{J_3}{2} s_{m_x+1, m_y, 3}^+ + \frac{J_1}{2} s_{m_x, m_y, 2}^+ + \frac{J_1}{2} s_{m_x+1, m_y, 4}^+ \right) P \\ \left. + P \left(\frac{J_3}{2} s_{m_x, m_y, 2}^- + \frac{J_3}{2} s_{m_x, m_y+1, 4}^- + \frac{J_1}{2} s_{m_x, m_y, 3}^- + \frac{J_1}{2} s_{m_x, m_y+1, 1}^- \right) P \right. \\ \left. \times P \left(\frac{J_3}{2} s_{m_x, m_y, 2}^+ + \frac{J_3}{2} s_{m_x, m_y+1, 4}^+ + \frac{J_1}{2} s_{m_x, m_y, 3}^+ + \frac{J_1}{2} s_{m_x, m_y+1, 1}^+ \right) P \right). \quad (\text{Д.25})$$

Введемо $T^{\pm}$ оператори:

$$Ps_1^- P = -\frac{1}{2}|d\rangle\langle u| = -\frac{1}{2}T^-, \quad Ps_2^- P = \frac{1}{2}|d\rangle\langle u| = \frac{1}{2}T^-, \\ Ps_3^- P = -\frac{1}{2}|d\rangle\langle u| = -\frac{1}{2}T^-, \quad Ps_4^- P = \frac{1}{2}|d\rangle\langle u| = \frac{1}{2}T^-, \\ Ps_1^+ P = -\frac{1}{2}|u\rangle\langle d| = -\frac{1}{2}T^+, \quad Ps_2^+ P = \frac{1}{2}|u\rangle\langle d| = \frac{1}{2}T^+, \\ Ps_3^+ P = -\frac{1}{2}|u\rangle\langle d| = -\frac{1}{2}T^+, \quad Ps_4^+ P = \frac{1}{2}|u\rangle\langle d| = \frac{1}{2}T^+. \quad (\text{Д.26})$$

Використовуючи ці позначення, запишемо

$$PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_{\alpha}\rangle \langle \varphi_{\alpha}|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_{\alpha}} VP = \\ = P \frac{(J_1 - J_3)^2}{-32J_2} \sum_{\mathbf{m}} \left(\left(T_{m_x, m_y}^- + T_{m_x+1, m_y}^- \right) \left(T_{m_x, m_y}^+ + T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \right. \\ \left. + \left(T_{m_x, m_y}^- + T_{m_x, m_y+1}^- \right) \left(T_{m_x, m_y}^+ + T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \right) P$$

$$\begin{aligned}
&= P \left(-\frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2} \sum_{\mathbf{m}} \left(1 - 2T_{m_x, m_y}^z + T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + T_{m_x, m_y}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) P.
\end{aligned} \tag{Д.27}$$

Остаточний результат можна компактно записати так:

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= P \sum_{\mathbf{m}} \left(\mathcal{C} - \mathbf{h} T_{\mathbf{m}}^z - \mathbf{J} \left(T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + T_{m_x, m_y}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) P, \\
\mathcal{C} &= -\frac{5}{2}h + \frac{3}{2}J - \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2}, \quad \mathbf{h} = h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2}, \\
\mathbf{J} &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2}.
\end{aligned} \tag{Д.28}$$

Д.3.2. Підхід локалізованих магніонів. Обчислимо $\mathcal{H} = \mathcal{P} H \mathcal{P}$, де оператор проектування

$$\mathcal{P} = \otimes_{\mathbf{m}} \mathcal{P}_{\mathbf{m}} \quad \mathcal{P}_{\mathbf{m}} = (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_{\mathbf{m}}. \tag{Д.29}$$

Маємо

$$\begin{aligned}
\mathcal{H} &= \mathcal{P} \left(\sum_{\mathbf{m}} \left(-\frac{3}{2}h - (h - 2J_2) T_{m_x, m_y}^z - \left(h - \frac{3}{2}J \right) \left(s_{m_x, m_y, 5}^z + s_{m_x, m_y, 6}^z \right) \right. \right. \\
&\quad + \frac{J}{2} \left(T_{m_x, m_y}^z s_{m_x, m_y, 5}^z + s_{m_x, m_y, 5}^z T_{m_x+1, m_y}^z + T_{m_x, m_y}^z s_{m_x, m_y, 6}^z + s_{m_x, m_y, 6}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right) \\
&\quad + \frac{J_1 - J_3}{2} \left(T_{m_x, m_y}^x s_{m_x, m_y, 5}^x + T_{m_x, m_y}^y s_{m_x, m_y, 5}^y + s_{m_x, m_y, 5}^x T_{m_x+1, m_y}^x + s_{m_x, m_y, 5}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right. \\
&\quad \left. \left. - T_{m_x, m_y}^x s_{m_x, m_y, 6}^x - T_{m_x, m_y}^y s_{m_x, m_y, 6}^y - s_{m_x, m_y, 6}^x T_{m_x, m_y+1}^x + s_{m_x, m_y, 6}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) \mathcal{P}.
\end{aligned} \tag{Д.30}$$

Рівняння (Д.30) відповідає спін- $\frac{1}{2}$ моделі Ізинга на декорованій квадратній ґратці. Далі, знайдемо $\mathcal{H}_{\text{main}}$

$$\begin{aligned}
\mathcal{H}_{\text{main}} &= \mathcal{P} \left(\sum_{\mathbf{m}} \left(-\frac{3}{2}h - (h - 2J_2) T_{m_x, m_y}^z - \left(h - \frac{3}{2}J \right) \left(s_{m_x, m_y, 5}^z + s_{m_x, m_y, 6}^z \right) \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + \frac{J}{2} \left(T_{m_x, m_y}^z s_{m_x, m_y, 5}^z + s_{m_x, m_y, 5}^z T_{m_x+1, m_y}^z + T_{m_x, m_y}^z s_{m_x, m_y, 6}^z + s_{m_x, m_y, 6}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right) \right) \right) \mathcal{P}.
\end{aligned}$$

Решта гамільтоніана є збуренням:

$$\begin{aligned} \mathcal{V} = \mathcal{P} \left(\frac{J_1 - J_3}{2} \sum_{\mathbf{m}} \left(T_{m_x, m_y}^x s_{m_x, m_y, 5}^x + T_{m_x, m_y}^y s_{m_x, m_y, 5}^y + s_{m_x, m_y, 5}^x T_{m_x+1, m_y}^x \right. \right. \\ \left. \left. + s_{m_x, m_y, 5}^y T_{m_x+1, m_y}^y - T_{m_x, m_y}^x s_{m_x, m_y, 6}^x - T_{m_x, m_y}^y s_{m_x, m_y, 6}^y \right. \right. \\ \left. \left. - s_{m_x, m_y, 6}^x T_{m_x, m_y+1}^x + s_{m_x, m_y, 6}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) \mathcal{P}. \end{aligned} \quad (\text{Д.31})$$

Розглядаємо збуджені стани з одним перевернутим спіном на вузлі, який з'єднує два сусідніх квадрати. Їхня енергія

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|u\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |u\rangle_{m_x+1, m_y} \dots = \\ = (\varepsilon_0 + 2J_2 - J) \dots (|u\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |u\rangle_{m_x+1, m_y} \dots, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|u\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |d\rangle_{m_x+1, m_y} \dots = \\ = \left(\varepsilon_0 + 2J_2 - \frac{J}{2} \right) \dots (|u\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |d\rangle_{m_x+1, m_y} \dots, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|d\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |u\rangle_{m_x+1, m_y} \dots = \\ = \left(\varepsilon_0 + 2J_2 - \frac{J}{2} \right) \dots (|d\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |u\rangle_{m_x+1, m_y} \dots, \\ \mathcal{H}_{\text{main}} \dots (|d\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |d\rangle_{m_x+1, m_y} \dots = \\ = (\varepsilon_0 + 2J_2) \dots (|d\rangle | \downarrow 5 \rangle)_{m_x, m_y} |d\rangle_{m_x+1, m_y} \dots \end{aligned} \quad (\text{Д.32})$$

Тому

$$\begin{aligned} P\mathcal{V} \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle \langle \varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} \mathcal{V}P = P \left(-\frac{(J_1 - J_3)^2}{32J_2} \right) \times \\ \times \sum_{\mathbf{m}} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x+1, m_y}^- \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x+1, m_y}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x+1, m_y}^- \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x+1, m_y}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \right. \\ \left. + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x+1, m_y}^- \right) \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x+1, m_y}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \right) \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x+1, m_y}^- \right) \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x+1, m_y}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \\
& + \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x, m_y+1}^- \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y+1}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \\
& + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x, m_y+1}^- \right) \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y+1}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \\
& + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x, m_y+1}^- \right) \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y+1}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \\
& + \left(T_{\mathbf{m}}^- + T_{m_x, m_y+1}^- \right) \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y+1}^z \right) \left(T_{\mathbf{m}}^+ + T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \Big) P.
\end{aligned} \tag{D.33}$$

Використаємо співвідношення $T^-(1/2 + T^z) = T^-$, $T^-(1/2 - T^z) = 0$, $(1/2 + T^z)T^+ = T^+$, $(1/2 - T^z)T^+ = 0$. Тоді

$$\begin{aligned}
P\mathcal{V} \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} \mathcal{V}P &= P \left(\left(-\frac{(J_1 - J_3)^2}{32J_2} \right) \sum_{\mathbf{m}} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- T_{\mathbf{m}}^+ \left(\frac{1}{2} + T_{m_x+1, m_y}^z \right) \right. \right. \right. \\
& + T_{\mathbf{m}}^- T_{m_x+1, m_y}^+ + T_{\mathbf{m}}^+ T_{m_x+1, m_y}^- + \left. \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) T_{m_x+1, m_y}^- T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \\
& + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- T_{\mathbf{m}}^+ \left(\frac{1}{2} - T_{m_x+1, m_y}^z \right) + \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) T_{m_x+1, m_y}^- T_{m_x+1, m_y}^+ \right) \\
& + \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- T_{\mathbf{m}}^+ \left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y+1}^z \right) + T_{\mathbf{m}}^- T_{m_x, m_y+1}^+ \right. \\
& + T_{\mathbf{m}}^+ T_{m_x, m_y+1}^- + \left. \left(\frac{1}{2} + T_{\mathbf{m}}^z \right) T_{m_x, m_y+1}^- T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \\
& + \left. \left. \left. \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^- T_{\mathbf{m}}^+ \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y+1}^z \right) + \left(\frac{1}{2} - T_{\mathbf{m}}^z \right) T_{m_x, m_y+1}^- T_{m_x, m_y+1}^+ \right) \right) \right) \right) P \\
&= P \left(\left(-\frac{(J_1 - J_3)^2}{32J_2} \right) \sum_{\mathbf{m}} \left(\left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right) - \frac{4}{1 - \frac{J}{4J_2}} T_{\mathbf{m}}^z \right. \right. \\
& + 2 \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{\mathbf{m}}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right) - 2 \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} - \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right) T_{\mathbf{m}}^z T_{m_x+1, m_y}^z \\
& + 2 \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} \left(T_{\mathbf{m}}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{\mathbf{m}}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) - 2 \left. \left. \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} - \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right) T_{\mathbf{m}}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right) \right) \right) P.
\end{aligned}$$

Отже, кінцевий результат для ефективного гамільтоніана запишеться так:

$$\begin{aligned}
 H_{\text{eff}} &= P \sum_{\mathbf{m}} \left(\mathcal{C} - \hbar T_{\mathbf{m}}^z - J \left(T_{\mathbf{m}}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{\mathbf{m}}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right) + J^z T_{\mathbf{m}}^z T_{m_x+1, m_y}^z \right. \\
 &\quad \left. - J \left(T_{\mathbf{m}}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{\mathbf{m}}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) + J^z T_{\mathbf{m}}^z T_{m_x, m_y+1}^z \right) P, \\
 \mathcal{C} &= \frac{3}{2}J - \frac{5}{2}\hbar - \frac{(J_1 - J_3)^2}{32J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} + \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right), \\
 \hbar &= \hbar - \hbar_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{8J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}}, \\
 J &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}}, \\
 J^z &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{16J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{2J_2}} - \frac{1}{1 - \frac{J}{4J_2}} \right).
 \end{aligned} \tag{Д.34}$$

Д.4. Узагальнений фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок

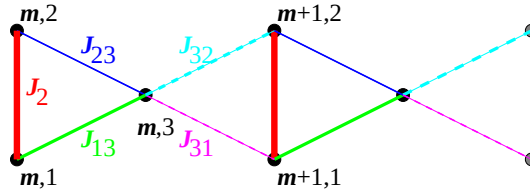


Рис. 6.5 Ромбічний спіновий ланцюжок, який описується гамільтоніаном (3.1). Магнони локалізовані на вертикальних димерах, які позначені товстими червоними лініями (J_2 зв'язки).

В цьому додатку ми проведемо обчислення ефективного гамільтоніана для узагальненого ромбічного ланцюжка (див. рис. 6.5). Провівши аналогічні обчислення, як для узагальненої ґратки квадратне кагоме (див. розділ 3), отримає-

мо:

$$\mathcal{H} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[-\frac{h}{2} - \frac{J_2}{4} - (h - J_2) T_m^z - (h - J) s_{m,3}^z + \frac{J_{13} + J_{23}}{2} T_m^z s_{m,3}^z \right. \\ \left. + \frac{-J_{13} + J_{23}}{\sqrt{2}} (T_m^x s_{m,3}^x + T_m^y s_{m,3}^y) + \frac{J_{31} + J_{32}}{2} s_{m,3}^z T_{m+1}^z \right. \\ \left. - \frac{J_{31} - J_{32}}{\sqrt{2}} (s_{m,3}^x T_{m+1}^x + s_{m,3}^y T_{m+1}^y) \right], J = \frac{J_{13} + J_{23} + J_{31} + J_{32}}{4}. \quad (\text{Д.35})$$

Ефективний гамільтоніан $\mathcal{H}_{\text{eff}}$ є таким:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} [\mathbf{J} (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y) + J^z T_m^z T_{m+1}^z - \mathbf{h} T_m^z + \mathbf{C}] \quad (\text{Д.36})$$

з наступними параметрами

$$\mathbf{J} = \frac{(-J_{13} + J_{23})(J_{31} - J_{32})}{4J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{J_2}}, \\ J^z = \frac{(-J_{13} + J_{23})^2 + (J_{31} - J_{32})^2}{8J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{J_2}} - 1 \right), \\ \mathbf{h} = h - h_1 - \frac{(-J_{13} + J_{23})^2 + (J_{31} - J_{32})^2}{8J_2}, \\ \mathbf{C} = -h - \frac{J_2}{4} + \frac{J}{2} - \frac{(-J_{13} + J_{23})^2 + (J_{31} - J_{32})^2}{32J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{J_2}} + 1 \right), \\ J = \frac{J_{13} + J_{23} + J_{31} + J_{32}}{4}, h_1 = J_2 + J. \quad (\text{Д.37})$$

В границі $J_{23} = J_{31} = J_1$ і $J_{13} = J_{32} = J_3$ ці результати збігаються з отриманими раніше у [18], див. рівняння (3.6) і (3.7) у [18], а також розділ 3. Про застосовність ефективного опису свідчать результати на рис. 6.6.

Д.5. Система зв'язаних димерів, що утворюють подвійний шар

Розглядаємо спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітну XXZ модель Гайзенберга системи зв'язаних димерів, що утворюють подвійний шар (рис. 6.7), у сильному магні-

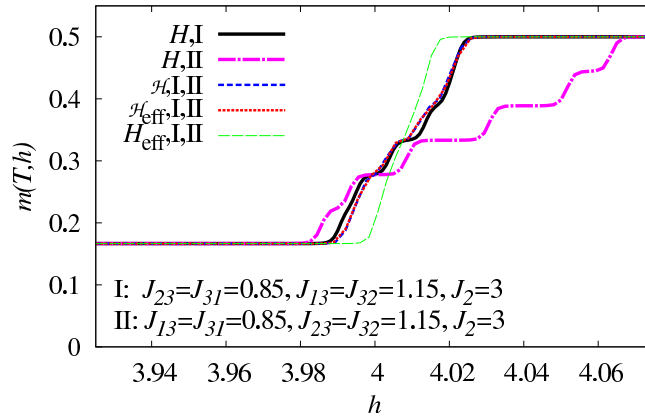


Рис. 6.6 Порівняння вихідної та отриманих ефективних моделей деформованого ромбічного спінового ланцюжка з $\mathcal{N} = 6$ комірок для кривих намагніченості при низьких температурах ($T = 0.001$). Перший набір параметрів (I): $J_{23} = J_{31} = 0.85$, $J_{13} = J_{32} = 1.15$, $J_2 = 3$. Другий набір параметрів (II): $J_{13} = J_{31} = 0.85$, $J_{23} = J_{32} = 1.15$, $J_2 = 3$.

тньому полі з наступним гамільтоніаном:

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) - \mathbf{h} \cdot \mathbf{S}. \quad (\text{Д.38})$$

Тут $J_{ij} > 0$, $0 \leq \Delta \leq 1$, і $\mathbf{S} = \sum_i \mathbf{s}_i$.

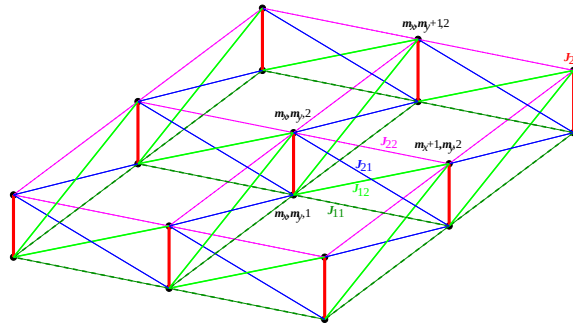


Рис. 6.7 Система зв'язаних димерів, що утворюють подвійний шар

Випадок $\Delta = 1$ і $\mathbf{h} = (0, 0, h)$ розглядався у працях [39, 69]. Однак, для експерименту важивий інший випадок: $\Delta = 0.15$ і $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$. Як і у випадку фрустрованого ромбічного ланцюжка у рівнянні (4.16) розглядатимемо дві орієнтації зовнішнього магнітного поля: 1) $\mathbf{h} = (0, 0, h)$ – магнітне поле спрямоване вздовж осі z (h^z -поле) і 2) $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$ – магнітне поле спрямоване вздовж осі x

(h^x -поле). Наша задача – збудувати ефективний гамільтоніан, який придатний при низьких температурах і сильних магнітних полях.

Д.5.1. Випадок $\mathbf{h} = (0, 0, h)$. Нехтуючи всіма взаємодіями крім J_2 , ми отримаємо набір $\mathcal{N}$ димерів. Два істотні стани на кожному димері при низьких температурах і сильних магнітних полях поблизу поля насичення $h_0 = \frac{J_2}{2}(\Delta + 1)$ є такі:

$$\begin{aligned} |u\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle, \\ |d\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle). \end{aligned} \quad (\text{Д.39})$$

Їх енергії – $\frac{\Delta}{4}J_2 - h$, $-\frac{1}{4}(2 + \Delta)J_2$, відповідно. Для випадку малих величин обмінних взаємодій J_{11} , J_{12} , J_{21} , J_{22} застосовуємо наближення сильного зв'язку для системи зв'язаних димерів. Знову ж таки, використовуючи операторну теорію збурень, для першого доданку рівняння (3.6) знайдемо

$$\begin{aligned} PHP &= P \sum_{\mathbf{m}} \left(-\frac{J_2}{4} + \frac{J}{2} - \frac{h}{2} - \left(h - \frac{J_2}{2}(\Delta_2 + 1) - 2J \right) T_{\mathbf{m}}^z \right. \\ &\quad + JT_{m_x, m_y}^z T_{m_x+1, m_y}^z + J_{XY} \left(T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right) \\ &\quad \left. + JT_{m_x, m_y}^z T_{m_x, m_y+1}^z + J_{XY} \left(T_{m_x, m_y}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) P \\ &= P \sum_{\mathbf{m}} \left(-\frac{J_2}{4} - \frac{h}{2} - (h - h_1) T_{\mathbf{m}}^z \right. \\ &\quad + J \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x+1, m_y}^z \right) \\ &\quad + J_{XY} \left(T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x+1, m_y}^y \right) \\ &\quad + J \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y+1}^z \right) \\ &\quad \left. + J_{XY} \left(T_{m_x, m_y}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) P, \end{aligned}$$

$$h_1 = \frac{J_2}{2}(\Delta_2 + 1) + 4J, J = \frac{J_{11}\Delta_{11} + J_{12}\Delta_{12} + J_{21}\Delta_{21} + J_{22}\Delta_{22}}{4},$$

$$J_{XY} = \frac{J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22}}{2}. \quad (\text{Д.40})$$

Це є спин- $\frac{1}{2}$ XXZ модель Гайзенберга на квадратній гратці.

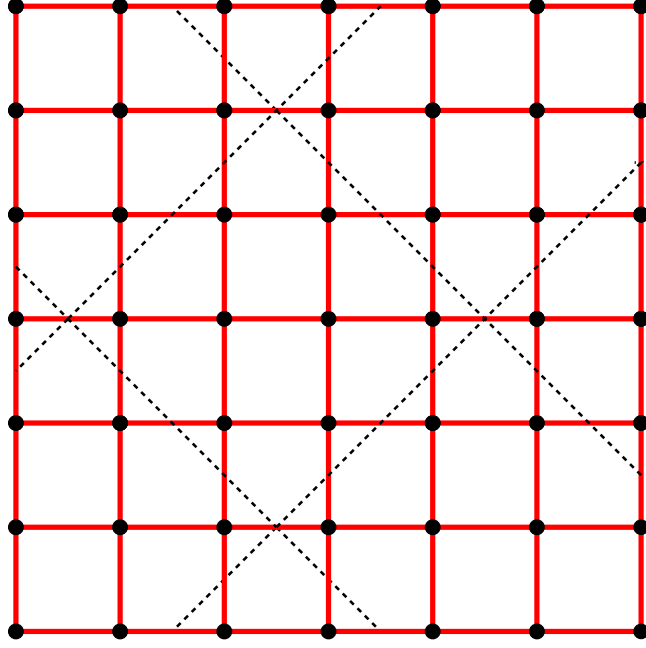


Рис. 6.8 Ефективний опис фрустрованого подвійного шару. Пунктирні криві окреслюють межі елементарної комірки, яка використовується для обчислень методом точної діагоналізації.

Д.5.2. Випадок $\mathbf{h} = (h, 0, 0)$. У випадку магнітного поля, прикладеного вздовж осі x , розглядаємо два наступні стани на кожному J_2 -димері: стан

$$|u\rangle = \alpha |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle + \beta |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle,$$

$$\alpha = \frac{1}{C} \left[h + \sqrt{\frac{(1-\Delta)^2}{16} J_2^2 + h^2} \right], \quad \beta = \frac{1}{C} \frac{1-\Delta}{4} J_2,$$

$$C = \sqrt{2} \sqrt{\frac{(1-\Delta)^2}{16} J_2^2 + h^2} \sqrt{\frac{(1-\Delta)^2}{16} J_2^2 + h^2 + h^2} \quad (\text{Д.41})$$

з енергією

$$\epsilon_u = [J_2 - \sqrt{(1-\Delta)^2 J_2^2 + 16h^2}]/4$$

та стан

$$|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle - |\downarrow_1\uparrow_2\rangle) \quad (\text{Д.42})$$

з енергією

$$\epsilon_d = -(2 + \Delta)J_2/4$$

. Крім того $h_0 = J_2\sqrt{\frac{1+\Delta}{2}}$. Виконавши прості обчислення, для першої частини першого доданку рівняння (3.6) отримаємо

$$\begin{aligned} PH_{\text{main}}P = \\ = P \sum_{\mathbf{m}=1}^{\mathcal{N}} \left[-\frac{1}{8} \sqrt{J_2^2(\Delta - 1)^2 + 16h_0^2} - \frac{J_2}{8}(\Delta + 1) - \right. \\ \left. T_{\mathbf{m}}^z \left(\frac{J_2}{4}(\Delta + 3) - \frac{1}{4} \sqrt{J_2^2(\Delta - 1)^2 + 16h_0^2} \right) \right] P. \end{aligned} \quad (\text{Д.43})$$

Зауваживши, що

$$\begin{aligned} Ps_1^- P &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-\alpha T^- + \beta T^+), \quad Ps_2^- P = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha T^- - \beta T^+), \\ Ps_1^+ P &= \frac{1}{\sqrt{2}} (-\alpha T^- + \beta T^+), \quad Ps_2^+ P = \frac{1}{\sqrt{2}} (\alpha T^- - \beta T^+), \end{aligned} \quad (\text{Д.44})$$

для другої частини першого доданку у рівнянні (3.6) отримаємо

$$\begin{aligned} PVP = P \sum_{\mathbf{m}} \left[\frac{1}{2} ((J_{11}\Delta_{11} - J_{12}\Delta_{12} - J_{21}\Delta_{21} + J_{22}\Delta_{22})(\beta - \alpha)^2 \right. \\ + 2\alpha\beta(J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22})) \times \\ \times (T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x+1, m_y}^y + T_{m_x, m_y}^x T_{m_x, m_y+1}^x + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y) \\ + \frac{1}{2} ((J_{11}\Delta_{11} - J_{12}\Delta_{12} - J_{21}\Delta_{21} + J_{22}\Delta_{22})(\beta - \alpha)^2 \\ - (\beta^2 + \alpha^2)(J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22})) \times \\ \times (T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x - T_{m_x, m_y}^y T_{m_x+1, m_y}^y + T_{m_x, m_y}^x T_{m_x, m_y+1}^x - T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y) \\ + \frac{J_{11} + J_{12} + J_{21} + J_{22}}{4} (\alpha^2 - \beta^2) \left(\left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x+1, m_y}^z \right) \right. \\ \left. + \left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y}^z \right) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y+1}^z \right) \right) - (\alpha^2 - \beta^2)(h - h_0) \left(\frac{1}{2} + T_{m_x, m_y}^z \right) \left. \right] P. \end{aligned} \quad (\text{Д.45})$$

Об'єднуючи рівняння (Д.44) і (Д.46), отримуємо наступний результат:

$$\begin{aligned}
 PHP = P \sum_{\mathbf{m}} & \left(-\frac{h}{2} - \frac{2+\Delta}{4} J_2 + \frac{J_2}{2} \sqrt{\frac{\Delta+1}{2}} - (h-h_1)(\alpha^2 - \beta^2) T_{\mathbf{m}}^z \right. \\
 & + J(\alpha^2 - \beta^2) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x+1, m_y}^z \right) \\
 & + J^x \left(T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x + T_{m_x, m_y}^x T_{m_x+1, m_y}^x \right) \\
 & + J(\alpha^2 - \beta^2) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y}^z \right) \left(\frac{1}{2} - T_{m_x, m_y+1}^z \right) \\
 & \left. + J^y \left(T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y + T_{m_x, m_y}^y T_{m_x, m_y+1}^y \right) \right) P, \\
 J^x = & (J_{11}\Delta_{11} - J_{12}\Delta_{12} - J_{21}\Delta_{21} + J_{22}\Delta_{22})(\beta - \alpha)^2 \\
 & - \frac{(\beta - \alpha)^2}{2}(J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22}), \\
 J^y = & \frac{(\beta + \alpha)^2}{2}(J_{11} - J_{12} - J_{21} + J_{22}), \\
 h_1 = & J_2 \sqrt{\frac{\Delta+1}{2}} + 4J, \\
 J = & \frac{J_{11} + J_{12} + J_{21} + J_{22}}{4}. \quad (\text{Д.46})
 \end{aligned}$$

Це є гамільтоніан $s = \frac{1}{2} XXZ$ моделі Гайзенберга на квадратній ґратці.

Для оцінки області застосовності отриманих ефективних моделей (Д.41) і (Д.47) для подвійного шару, порівняймо їх передбачення з результатами для вихідної моделі. Використовуючи точну діагоналізацію, знайдемо криві намагніченості в магнітному полі, прикладеному вздовж осі z та вздовж осі x . Ми розглядаємо систему з $N = 16$ вузлів (тобто $\mathcal{N} = 8$ комірок) з періодичними граничними умовами див. рис. 6.7 і $J_{11} = J_{12} = J_{21} = J_{22} = 1$ (ідеальна геометрія), $J_2 = 5$ та $\Delta = 0.5, 0.1$. Результати приведені на рис. 6.9.

Д.5.3. Застосування до магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. Застосуємо ефективний опис для пояснення деяких низькотемпературних властивостей магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$. В роботі [15] представлені результати експериментальних досліджень кривих намагніченості у випадку магнітного поля,

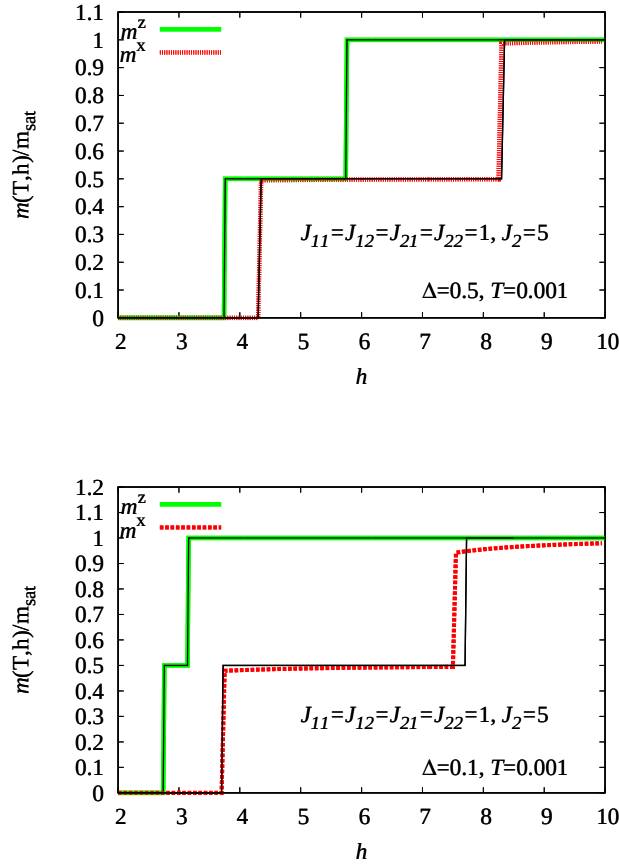


Рис. 6.9 Низькотемпературні криві намагніченості $m(T, h)$ подвійного шару для магнітного поля, прикладеного вздовж осі z (товста суцільна крива) та вздовж осі x (товста пунктирна крива), з набором параметрів $J_{11} = J_{12} = J_{21} = J_{22} = 1$ (ідеальна геометрія), $J_2 = 5$, $\Delta = 0.5, 0.1$, для $\mathcal{N} = 8$ комірок. Тонкі чорні криві — результати на основі ефективної теорії, див. (Д.41) і (Д.47).

спрямованого вздовж кристалографічної осі c^* ($H \parallel c^*$), та у випадку магнітного поля, спрямованого перпендикулярно площині ab ($H \parallel ab$). Умова $H \parallel c^*$ відповідає випадку $H \parallel z$. Експериментальні результати приведено на рис. 6.10. Результати теоретичних обчислень показані на рис. 6.11. Теоретичні передбачення узгоджуються з результатами експериментальних вимірювань.

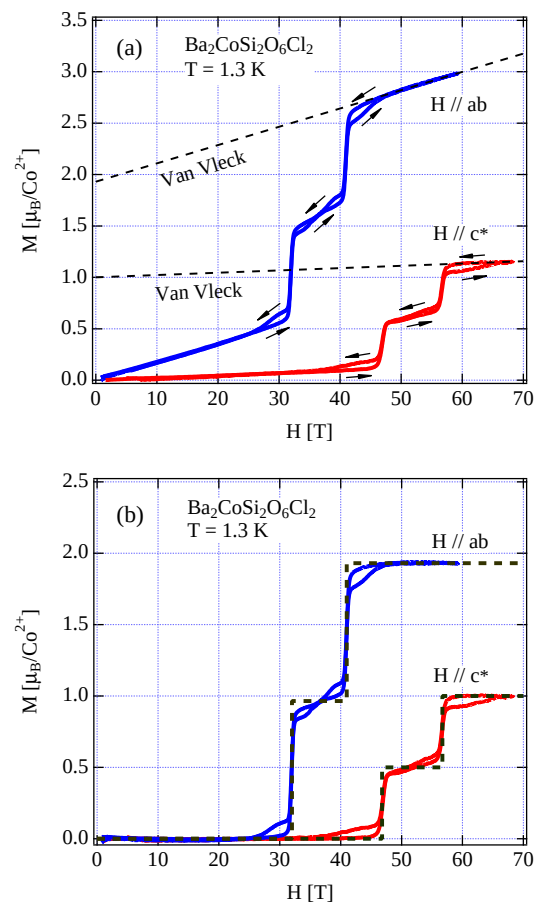


Рис. 6.10 Експериментальні результати для кривих намагніченості магнітної сполуки $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ при низьких температурах. Цей рисунок взято з [15].

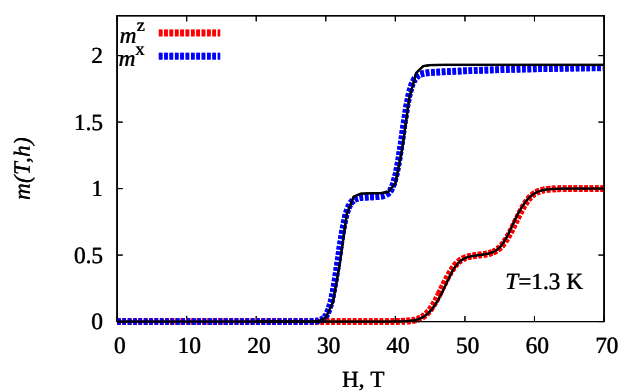


Рис. 6.11 Низькотемпературні криві намагніченості $m(T, h)$ подвійного шару для магнітного поля, прикладеного вздовж осі z (червона крива) та вздовж осі x (синя крива) з набором параметрів для $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$.

Д.6. Виведення ефективних гамільтоніанів для ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга

Тут приведемо деталі виведення ефективного гамільтоніана (5.8). Обчислимо кожний доданок рівняння (5.7).

Для H_0 (5.1) при $h = h_{\text{sat}} = 2I$ маємо $H_0|\varphi_0\rangle = \varepsilon_0|\varphi_0\rangle$, $PH_0P = \varepsilon_0$, $\varepsilon_0 = \mathcal{N}(-2I + J/4)$. Крім того,

$$\begin{aligned} - (h - h_{\text{sat}}) (\mu_k^z + s_{k,1}^z + s_{k,2}^z) |u\rangle_k &= -\frac{3}{2} (h - h_{\text{sat}}) |u\rangle_k, \\ - (h - h_{\text{sat}}) (\mu_k^z + s_{k,1}^z + s_{k,2}^z) |d\rangle_k &= -\frac{1}{2} (h - h_{\text{sat}}) |d\rangle_k, \end{aligned} \quad (\text{Д.47})$$

і ми отримаємо

$$PH_0P = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left[-2I + \frac{J}{4} - \frac{3}{2} (h - 2I) (|u\rangle\langle u|)_k - \frac{1}{2} (h - 2I) (|d\rangle\langle d|)_k \right] \quad (\text{Д.48})$$

для довільного h . Використовуючи рівняння (5.6), запишемо рівняння (Д.49) наступним чином:

$$PH_0P = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left[\frac{J}{4} - h - (h - 2I) T_k^z \right]. \quad (\text{Д.49})$$

Крім того,

$$\begin{aligned} V_{k,k+1}|u\rangle_k|u\rangle_{k+1} &= 0, \\ V_{k,k+1}|u\rangle_k|d\rangle_{k+1} &= \frac{\delta I}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k |u\rangle_{k+1}, \\ V_{k,k+1}|d\rangle_k|u\rangle_{k+1} &= \frac{\delta I}{\sqrt{2}} (|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k |u\rangle_{k+1}, \\ V_{k,k+1}|d\rangle_k|d\rangle_{k+1} &= \frac{\delta I}{\sqrt{2}} [(|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k |d\rangle_{k+1} + (|\downarrow\rangle|t, 0\rangle)_k |u\rangle_{k+1}], \end{aligned} \quad (\text{Д.50})$$

де $|t, 0\rangle = (|\uparrow_1\downarrow_2\rangle + |\downarrow_1\uparrow_2\rangle)/\sqrt{2}$. Важливо зауважити, що енергія стану $(|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k |u\rangle_{k+1}$ є більша, ніж енергія стану $|u\rangle_k|d\rangle_{k+1}$ і $|d\rangle_k|u\rangle_{k+1}$ на I , тоді як енергія стану $(|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k |d\rangle_{k+1}$ і $(|\downarrow\rangle|t, 0\rangle)_k |u\rangle_{k+1}$ є більшою за енергію стану $|d\rangle_k|d\rangle_{k+1}$ на $2I$; це можна легко показати, провівши прості обчислення.

З рівняння (Д.51) бачимо, що ненульовий результат дії $V_{k,k+1}$ дає нові стани k -ї комірки. З (Д.51) отримаємо

$$PVP = 0. \quad (\text{Д.51})$$

Однак, другий доданок в рівнянні (5.7) може бути ненульовим. Справді,

$$\begin{aligned} PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP = \\ = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left\{ \frac{\left(\frac{\delta I}{\sqrt{2}}\right)^2}{-I} \left[(|u\rangle\langle u|)_k (|d\rangle\langle d|)_{k+1} + (|u\rangle\langle d|)_k (|d\rangle\langle u|)_{k+1} \right. \right. \\ \left. \left. + (|d\rangle\langle u|)_k (|u\rangle\langle d|)_{k+1} + (|d\rangle\langle d|)_k (|u\rangle\langle u|)_{k+1} \right] \right. \\ \left. + \frac{\left(\frac{\delta I}{\sqrt{2}}\right)^2}{-2I} 2 (|d\rangle\langle d|)_k (|d\rangle\langle d|)_{k+1} \right\}. \quad (\text{Д.52}) \end{aligned}$$

Виконавши певні спрощення, отримаємо:

$$\begin{aligned} PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP = -\frac{\delta^2 I}{2} \\ \times \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left[\frac{3}{4} - T_k^z + 2 (T_k^x T_{k+1}^x + T_k^y T_{k+1}^y) - T_k^z T_{k+1}^z \right]. \quad (\text{Д.53}) \end{aligned}$$

Об'єднуючи рівняння (Д.50), (Д.52), та (Д.54) отримаємо наступний ефективний гамільтоніан

$$\begin{aligned} H_{\text{eff}} = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left[\frac{J}{4} - h - \frac{3\delta^2 I}{8} - \left(h - 2I - \frac{\delta^2 I}{2} \right) T_k^z \right. \\ \left. - \delta^2 I (T_k^x T_{k+1}^x + T_k^y T_{k+1}^y) + \frac{\delta^2 I}{2} T_k^z T_{k+1}^z \right], \quad (\text{Д.54}) \end{aligned}$$

тобто H_{eff} , який представлений у (5.8).

Далі приведемо виведення гамільтоніана (5.12). Розглядаємо стани $|u\rangle = \dots (|\downarrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_k \dots$ і $|d\rangle = \dots (|\uparrow\rangle|\downarrow_1\downarrow_2\rangle)_k \dots$, оператор проектування

$P = |u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|$ і (псевдо)спін-1/2 оператори $T^z = (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|)/2$, $T^+ = |u\rangle\langle d|$, $T^- = |d\rangle\langle u|$, що представлені у рівняннях (5.5) і (5.6). Провівши всі необхідні обчислення, ми отримаємо, що $PH_0P = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}}(-I + J/4 - hT^z)$. Крім того,

$$\begin{aligned} V_{k,k+1}|u\rangle &= \frac{\delta I}{\sqrt{2}} [\dots (|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k \dots + \dots (|\downarrow\rangle|t, 0\rangle)_k (|\uparrow\rangle|\uparrow_1\uparrow_2\rangle)_{k+1} \dots], \\ V_{k,k+1}|d\rangle &= \frac{\delta I}{\sqrt{2}} [\dots (|\downarrow\rangle|t, 0\rangle)_k \dots + \dots (|\uparrow\rangle|t, 0\rangle)_k (|\downarrow\rangle|\downarrow_1\downarrow_2\rangle)_{k+1} \dots]; \end{aligned} \quad (\text{Д.55})$$

енергія збуджених станів, як з'являються в правій стороні рівняння (Д.56) є більшою за енергію основного стану на $2I$. Очевидно, що $PVP = 0$ і

$$\begin{aligned} & PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP \\ &= \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left[\frac{\left(\frac{\delta I}{\sqrt{2}}\right)^2}{-2I} 2|u\rangle\langle u| + \frac{\left(\frac{\delta I}{\sqrt{2}}\right)^2}{-2I} 2|d\rangle\langle d| \right] = \sum_{k=1}^{\mathcal{N}} \left(-\frac{\delta^2 I}{2} \right). \end{aligned} \quad (\text{Д.56})$$

Об'єднуючи все разом, отримаємо рівняння (5.12).