

Національна академія наук України
Інститут фізики конденсованих систем

Максименко Микола Володимирович

УДК 537.9, 537.622

**Ефекти локалізованих станів
у низькотемпературних властивостях
квантових ґраткових систем**

01.04.02 – теоретична фізика

АВТОРЕФЕРАТ
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2012

Дисертацією є рукопис.

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

Науковий керівник — доктор фізико-математичних наук,
Держко Олег Володимирович,
— Інститут фізики конденсованих систем НАН України, завідувач відділу теорії модельних спінових систем.

Офіційні опоненти — доктор фізико-математичних наук, професор
Колежук Олексій Костянтинович,
— Інституту високих технологій Київського Національного Університету ім. Т. Шевченка

— доктор фізико-математичних наук,
Швайка Андрій Михайлович,
— Інститут фізики конденсованих систем НАН України, провідний науковий співробітник.

Захист відбудеться 20 червня 2012 року о 15.30 на засіданні спеціалізованої вченої ради Д35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою: 79011 м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

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

Автореферат дисертації розіслано "18"травня 2012 року.

Вчений секретар
спеціалізованої вченої ради Д35.156.01
канд. фіз.-мат. наук

Загальна характеристика роботи

Дослідження квантових ґраткових моделей (модель квантового антиферромагнетика Гайзенберга, модель Габбарда та ін.) на класі ґраток, геометрія яких дозволяє існування локалізованих хвильових функцій (електронів, магнонів, тощо), є темою інтенсивних досліджень протягом останніх років (див. Derzhko O. et.al. // *Low Temperature Physics*–2007.–V.33–P.745, Derzhko O. et.al. // *Physical Review B*–2007–V.76–P.220402(R) та посилання у цих роботах). Наявність локалізованих одночастинкових основних станів у таких моделях дозволяє збудувати багаточастинкові основні стани і описати ряд ефектів при низьких температурах, як от: наявність стрибка намагніченості у полі насичення для квантового антиферромагнетика Гайзенберга, наявність у таких моделях скінченної ентропії при нульовій температурі $T = 0$, феромагнетизму основних станів моделі Габбарда у широкому околі (малих) концентрацій електронів та ін. Окрім нових ефектів при низьких температурах ці системи є важливим прикладом точно розв'язуваних моделей, що дозволяють описати складну фізику не використовуючи наближених методів.

Актуальність теми. Можливість побудови багаточастинкових основних станів для описаних вище моделей відкрила шлях для точного опису низькотемпературних властивостей цих систем шляхом мапування основних багаточастинкових станів на ґратковий газ жорстких об'єктів (Derzhko O. et.al. // *Low Temperature Physics*–2007.–V.33–P.745). Ця ідея була використана для знаходження низькотемпературних характеристик квантового антиферромагнетика Гайзенберга на ряді фрустрованих ґраток. Пізніше, на прикладі дельтаподібного ланцюжка (одновимірний ґратка Тасакі) подібний підхід був реалізований і для моделі Габбарда (Derzhko O. et.al. // *Physical Review B*–2007–V.76–P.220402(R)). В цьому випадку відображення на газ жорстких об'єктів є нетривіальним внаслідок наявності виродження Крамерса в окремих феромагнітних кластерів з локалізованих електронів.

Попри те, що локалізовані стани активно вивчались як у квантовій моделі антиферромагнетика Гайзенберга так і в моделі Габбарда, їхні ефекти на ґратках з непарною кількістю вузлів у комірках (наприклад трикутні комірки) не були досліджені досі. Такі ґратки є цікавими тим, що локалізовані стани у комірці мають додаткову ступінь вільності – кіральність, що спричиняє двократне виродження локалізованого стану і може призвести до змін у низькотемпературних властивостях.

Варто зауважити, що термодинаміка моделі Габбарда на ґратках з локалізованими станами була розглянута лише для дельтаподібного ланцюжка. Відомо, що у ґратках кагоме можуть виникати і інші основні стани, які локалізуються на замкнених петлях, що охоплюють ґратку. У цьому випадку задача про низькотемпературну термодинаміку та феромагнетизм в основному стані, який виникає внаслідок утворення феромагнітних кластерів з локалізованих електронів, ускладнюється, а подібна проблема не розглядалась раніше.

Інтерес становить і опис феромагнітного переходу, що може виникнути в моделі

Габбарда на двовимірній ґратці Тасакі. Відомо, що для таких систем існує область малих концентрацій, для яких система перебуває у феромагнітному основному стані (Tasaki H. // Physical Review Letters. – 1992. – Vol. 68. – P.1608). Проте точне значення концентрації електронів, для якої стається фазовий перехід, та природа цього переходу досі залишались невідомими.

Згадані проблеми було розглянуто у дисертаційній роботі.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами. Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згідно з планами робіт за темою № 0108U001154 "Моделювання фізичних властивостей квантових ґраткових систем з сильними багаточастинковими кореляціями". Частина досліджень була проведена в університетах Геттінгена і Магдебурга (Німеччина) та інституті Макса Планка фізики складних систем у місті Дрезден (Німеччина) за підтримки проекту DFG (SB 602) (2010 р.), стипендії для аспірантів та молодих вчених німецького центру академічних обмінів DAAD (2011 р.), гостьової програми інституту Макса Планка фізики складних систем (2011 р.).

Мета і завдання дослідження. *Мета дослідження* полягає у вивченні низькотемпературних властивостей квантових ґраткових систем (низькотемпературної термодинаміки та магнітних властивостей) на ряді ґраток, що допускають існування локалізованих одночастинкових станів (дельтаподібний ланцюжок, ланцюжки кагоме, фрустрована трикутна трубка, ланцюжок подвійних тетраедрів, двовимірна ґратка Тасакі), і пошуку характерних ефектів, зумовлених наявністю локалізованих станів у таких системах. У роботі для досягнення мети були передбачені такі *завдання*:

- побудова багаточастинкових основних станів для досліджуваних моделей та обчислення кратності їх виродження, використовуючи ефективні моделі класичних ґраткових газів;
- знаходження методом матриці переносу точного внеску основних станів у низькотемпературні характеристики досліджуваних одновимірних систем;
- отримання повного спектру відповідних моделей для скінченних (малих) систем за допомогою методу точної діагоналізації і виявлення області, в якій модель ґраткового газу дає добрий опис низькотемпературної термодинаміки досліджуваних систем;
- вивчення механізмів зняття виродження за кіральністю у ланцюжках з трикутними пастками;
- дослідження переходу у феромагнітний основний стан електронної моделі на двовимірній ґратці Тасакі в рамках теорії перколяції.

Об'єктом дослідження виступають квантові ґраткові системи (антиферомагнетик Гайзенберга, електронна модель Габбарда) на фрустрованих ґратках (фрустрована трикутна трубка, ланцюжок подвійних тетраедрів, дельтаподібний ланцюжок, два типи ланцюжків кагоме, двовимірна ґратка Тасакі). *Предметом дослідження* даної роботи є характерні ефекти у низькотемпературних властивостях цих систем у сильних магнітних полях (антиферомагнетик Гайзенберга), або певному значенні хімічного потенціалу (модель Габбарда).

Методи дослідження. У роботі використовується: метод матриці переносу для аналізу одновимірних класичних ґраткових газів та перколяції; числовий метод точної діагоналізації для дослідження скінченних спінових та електронних систем; метод Монте Карло для симуляції двовимірної задачі про зважену перколяцію з використанням модифікацій алгоритмів маркування кластерів Ньюмена-Зіффа та Хошена-Копельмана.

Наукова новизна одержаних результатів. У дисертаційній роботі вперше застосовано концепцію локалізованих станів до ґраток в яких одночастинковий локалізований стан є виродженим (фрустрована трикутна трубка, ланцюжок подвійних тетраєдрів). Отримані результати свідчать, що додаткова ступінь вільності (кіральність трикутника) призводить до нових ефектів та масштабів енергії у низькотемпературних властивостях квантових ґраткових систем (антиферромагнетик Гайзенберга та модель Габбарда). Зняття виродження за кіральністю (врахування взаємодії Дзялошинського-Морії у моделі Гайзенберга або поперечного магнітного поля у моделі Габбарда, та чотиричастинкових взаємодій, що спричиняють поширення кіральності) у досліджуваних ланцюжках призводить до ефективного псевдоспін-1/2 XX ланцюжка у поперечному полі, в якому кіральність представлена оператором псевдоспіну.

З допомогою концепції локалізованих станів вперше зроблено детальний аналіз низькотемпературної термодинаміки стандартної одноорбітальної моделі Габбарда на деяких одновимірних ланцюжках: дельтаподібний ланцюжок та два ланцюжки кагоме. Показано, що у термодинамічній границі усі три ланцюжки виявляють однакову універсальну низькотемпературну поведінку. Вперше знайдено аналітичний вираз для повного магнітного моменту на таких ланцюжках при концентрації електронів $n\mathcal{N} < 1$ (де \mathcal{N} – число комірок-пасток у ланцюжках) і показано, що у термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ феромагнетизм зникає для будь-яких концентрацій електронів $n\mathcal{N} < 1$.

Вперше досліджено перехід у феромагнітний основний стан моделі Габбарда на двовимірній ґратці Тасакі. Знайдено новий тип скорельованої перколяційної проблеми – так звана зважена перколяція, який описує статистику феромагнітних кластерів локалізованих електронів на такій ґратці. Запропоновано ефективний алгоритм для числового аналізу зваженої перколяції. Знайдено границі області концентрацій електронів у якій основний стан є феромагнітним.

Практичне значення одержаних результатів. Отримані у даній роботі результати можуть мати практичне значення для подальших теоретичних та експериментальних досліджень. Так, скінченне значення ентропії при температурі $T = 0$ при малих концентраціях електронів (модель Габбарда) або при полі насичення (модель Гайзенберга) свідчить про можливість сильного магнетокалоричного ефекту у таких системах. Досліджене у дисертаційній роботі маніпулювання кіральністю у ланцюжках з трикутними пастками робить ці моделі цікавими з точки зору кандидатів на твердотільну реалізацію елементів квантових комп'ютерів. Плоскозонний феромагнетизм моделі Габбарда є важливим напрямком досліджень протягом останніх років. Існує ряд сполук, що можуть ставати феромагнітними завдяки наявності плоскої зони у спектрі (Gulacsi Z. et.al. // Progress of Theoretical Physics. – 2008. – Vol. 176. – P. 1). Окрім того цей механізм призводить до

ферромагнітних основних станів у сполуках, що за інших умов не є магнітними, як от органічні полімери (Gulacsi Z. et.al. // Physical Review Letters. – 2010. – Vol. 105. – P. 266403).

Особистий внесок здобувача У виконаних у співавторстві роботах, авторів належить:

- аналітичні розрахунки методом матриці переносу внеску локалізованих станів у низькотемпературні характеристики антиферромагнетика Гайзенберга та моделі Габбарда на ланцюжках з трикутними пастками, що опубліковані у праці [3] та розділі 3 статті [4];
- дослідження термодинаміки моделі Гайзенберга на трикутній трубці з врахуванням перших збуджених рівнів (розділ 4 статті [4]) та механізмів зняття виродження за кіральністю для спінової та електронної моделей (розділ 5 статті [4]);
- числові розрахунки кратностей виродження електронної моделі на ланцюжка кагоме, представлені у розділі IV с) статті [1], та аналітичні розрахунки методом матриці переносу внеску локалізованих станів у низькотемпературні характеристики моделі Габбарда на ланцюжках кагоме опубліковані у розділі V статті [1];
- числовий аналіз ферромагнетизму основних станів моделі Габбарда на скінченних ланцюжках кагоме представлений у розділі VI статті [1] та у статті [2];
- розробка Монте Карло алгоритму для дослідження зваженої перколяції, що виникає у задачі про ферромагнетизм основних станів моделі Габбарда на ґратках Тасаки; знаходження кривої для повного магнітного моменту і нормованого числа кластерів, опублікованих у препринті [5];
- розвинення методу матриці переносу для точного розв'язку одновимірної задачі про зважену перколяцію, яка виникає для електронної моделі на дельтаподібному ланцюжку [5];

Апробація результатів дисертації Результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на наукових семінарах Інституту фізики конденсованих систем НАН України та університетів Геттінгена і Магдебурга, а також на наукових конференціях: "Еврика 2009"(Львів, 20-22 травня 2009 р.), "IX Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини"(Львів, 28-29 травня 2009 р.), "Statistical Physics 2009: Modern Trends and Applications"(Львів, 23-25 червня 2009 р.), "International Conference on Magnetism"(Карлсруе, Німеччина, 26-31 липня 2009 р.), "European School on Magnetism"(Тімішоару, Румунія, 1-10 вересня 2009 р.), "IX Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини"(Львів, 3-4 червня 2010 р.), "14-th Czech and Slovak Conference on Magnetism"(Кошице, Словаччина, 6-9 липня 2010 р.), "QFS 2010: International Symposium on Quantum Fluids and Solids"(Гренобль, Франція, 1-7 серпня 2010 р.), "MECO 36: 36th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics"(Львів, 1-7 квітня 2011 р.), "IX Всеукраїнська школа-семінар та конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини"(Львів, 3-4 червня, 2011 р.).

Публікації. За матеріалами дисертації опубліковано 4 статті [1-4], препринт Інституту фізики конденсованих систем НАН України [5] та 10 тез конференцій [6-15].

Структура та об'єм дисертації Дисертаційна робота викладена на 131 сторінці (101 сторінка основного тексту), складається з вступу, чотирьох розділів, висновків, списку використаних джерел з 114 пунктів та п'яти додатків обсягом 16 сторінок.

Основний зміст роботи

У першому розділі зроблено огляд стану проблеми, якої стосується дисертація. Описано механізм локалізації хвильової функції, спричинений геометрією ґраток, та ряд ефектів, що при цьому виникають. Обговорено проблеми, для опису яких використовували концепцію локалізованих станів, та представлено проблеми, які розглядаються у дисертаційній роботі.

У другому розділі концепцію локалізованих станів застосовано для знаходження низькотемпературної термодинаміки антиферромагнетика Гайзенберга з гамільтоніаном

$$H_s = \sum_{(ij)} J_{ij} s_i \cdot s_j - h S^z, S^z = \sum_i s_i^z, \quad (1)$$

та моделі Габбарда з відштовхуванням, що описується гамільтоніаном

$$H_e = \sum_{\sigma=\uparrow,\downarrow} H_{0,\sigma} + U \sum_i n_{i,\uparrow} n_{i,\downarrow},$$
$$H_{0,\sigma} = \sum_{(ij)} t_{ij} \left(c_{i,\sigma}^\dagger c_{j,\sigma} + c_{j,\sigma}^\dagger c_{i,\sigma} \right) + \mu \sum_i n_{i,\sigma}, U > 0, \quad (2)$$

на одновимірних ґратках з трикутними комітками-пастками 1, див. рис. 1. Попередні дослідження стосувалися випадку, коли основний стан електрона чи магнона у пастці був невироджений. Трикутні пастки є найпростішим випадком, коли такий одночастинковий основний стан стає двократно виродженим. Хвильові функції виродженого стану різняться кіральністю. Поява цього нового ступеня вільності призводить як до кількісних так і до якісних змін у низькотемпературній термодинаміці сильноскорельованої системи.

У координатному просторі хвильові функції частинок з енергією найнижчої одночастинкової зони (яка є бездисперсійною для усіх моделей, розглянутих у дисертації) можна записати у вигляді лінійної комбінації станів Блоха, які локалізовані у трикутниках-пастках з індексами $m = 1, 2, \dots, \mathcal{N}$, див. рис. 1. Для спінової моделі маємо:

$$|+\rangle_m = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(s_{m,1}^- + \omega s_{m,2}^- + \omega^2 s_{m,3}^- \right) |FM\rangle,$$
$$|-\rangle_m = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(s_{m,1}^- + \omega^2 s_{m,2}^- + \omega s_{m,3}^- \right) |FM\rangle, \quad (3)$$

де $|FM\rangle$ означає повністю феромагнітний стан (вакуумний стан для магнонів).

Відповідно для електронної моделі

$$|+\rangle_m = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(c_{m,1}^\dagger + \omega c_{m,2}^\dagger + \omega^2 c_{m,3}^\dagger \right) |0\rangle,$$
$$|-\rangle_m = \frac{1}{\sqrt{3}} \left(c_{m,1}^\dagger + \omega^2 c_{m,2}^\dagger + \omega c_{m,3}^\dagger \right) |0\rangle, \quad (4)$$

де $|0\rangle$ є вакуумний стан. Спіновий індекс σ для електронної моделі опущено, бо він не грає ролі в одночастинковій задачі. В обидвох випадках ми ввели позначення $\omega = e^{2\pi i/3}$. Можна сконструювати оператор кіральності (закрученості), що діятиме наступним чином: $\chi m |\uparrow\rangle_m = +/- |\uparrow\rangle_m$. Таким чином двократне виродження плоских зон відповідає двом різним значенням кіральності трикутника.

Багаточастинкові основні стани у підпросторах з $n \leq n_{\max} \propto N$ магنونів або електронів є збудовані з незалежних локалізованих одночастинкових станів. Для цього ми розміщуємо одночастинкові локалізовані стани у різних трикутниках-пастках. Для різних ланцюжків та моделей необхідно також притримуватись правил, за яких такі стани залишатимуться основними. Для цього зручно відобразити задачу на ґратковий газ жорстких об'єктів (димери, мономери та ін.). В підпросторі з n магнонами (електронами) кратність виродження основного стану $g^{\mathcal{N}}(n)$ є рівною числу можливих розміщень локалізованих станів у дозволених трикутних пастках (з врахуванням принципу Паулі для електронних систем). Це число пов'язане з числом просторових конфігурацій відповідних жорстких об'єктів. Знайшовши $g^{\mathcal{N}}(n)$ для всіх розглянутих випадків, отримуємо внесок локалізованих станів у статистичну суму і термодинамічні функції систем.

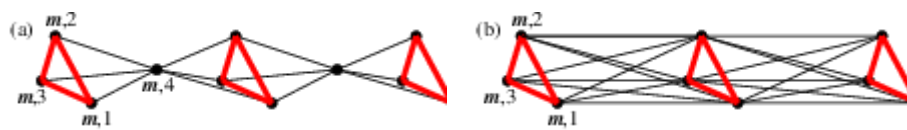


Рис. 1: Два одновимірні ланцюжки з трикутними пастками: (а) ланцюжок подвійних тетраедрів і (б) фрустрована тринога драбинка (або фрустрована трикутна трубка). Обмінні інтеграли або інтеграли переносу вздовж сторін трикутників вибрані наступним чином: $J_2 > 0$ або $t_2 > 0$ (жирні лінії) і $J_1 > 2J_1$ або $t_1 > 2t_1$ (тонкі лінії).

Для спінової моделі на ланцюжку тетраедрів можемо записати такий вираз для вільної енергії

$$\frac{F_{lm}(T, h, N)}{\mathcal{N}} = \frac{E_{FM}}{\mathcal{N}} - \frac{N}{2\mathcal{N}}h - T \ln(1 + 2z), \quad z = e^{\frac{h_1 - h}{T}}, \quad h_1 = \varepsilon, \quad (5)$$

тоді як для спінової моделі на фрустрованій трикутній трубці

$$\frac{F_{lm}(T, h, N)}{\mathcal{N}} = \frac{E_{FM}}{\mathcal{N}} - \frac{N}{2\mathcal{N}}h - T \frac{\ln(\lambda_1^{\mathcal{N}} + \lambda_2^{\mathcal{N}})}{\mathcal{N}},$$

$$\lambda_{1,2} = \frac{1}{2} \pm \sqrt{\frac{1}{4} + 2z}, \quad z = e^{\frac{h_1 - h}{T}}, \quad h_1 = \varepsilon. \quad (6)$$

Тут E_{FM} – енергія феромагнітного стану. За наявності магнітного поля $h \approx h_1$ (поле насичення) основний внесок в низькотемпературні властивості (при $T \rightarrow 0$ важливою є область малих енергій) даватимуть основні стани, що описуються локалізованими магнонами. За таких умов вільна енергія $F_{lm}(T, h, N)$ (5) та (6) дає добрий опис низькотемпературної термодинаміки спінової системи.

Великий термодинамічний потенціал електронної моделі для обох ґраток

$$\frac{\Omega_{le}(T, \mu, N)}{\mathcal{N}} = -T \ln(1 + 4z + 3z^2), \quad z = e^{\frac{\varepsilon - \mu}{T}}. \quad (7)$$

Знову ж таки, коли хімічний потенціал μ близький до $\mu_0 = \varepsilon$ внесок від локалізованих станів є вирішальним. Великий термодинамічний потенціал $\Omega_{le}(T, \mu, N)$ (7) дає добрий опис низькотемпературних властивостей електронної моделі при $\mu \approx \mu_0$.

Зупинимось на експериментально досяжних характеристиках, обчислюючи

ентропію і теплоємність спінової та електронної моделей. На рис.2 показано температурну залежність теплоємності спінової моделі на ланцюжку подвійних тетраедрів. Порівнюючи аналітичні результати, що отримані на основі опису основних станів жорсткими об'єктами (мономерами), з даними точної діагоналізації повної спінової моделі легко оцінити область, де добре працює опис у термінах жорстких об'єктів.

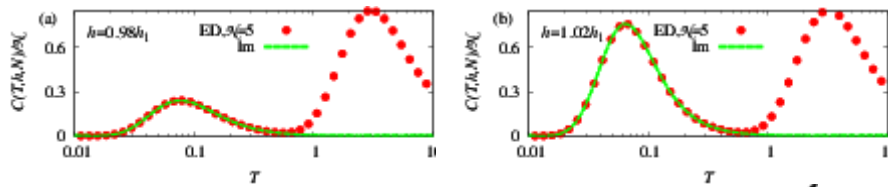


Рис. 2: Залежність теплоємності для спінової моделі $C(T, h, N) / (k_B N)$ від температури T для h близьких до h_1 на ланцюжку подвійних тетраедрів з $N = 20$ вузлів ($J_1 = 1, J_2 = 5$). Символи на графіках відповідають значенням точної діагоналізації, пунктирні лінії є передбаченнями на основі картини незалежних локалізованих магніонів (5).

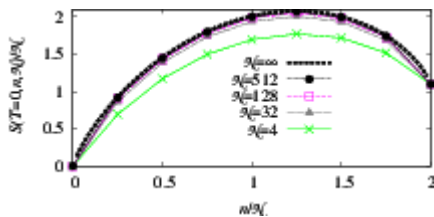


Рис. 3: Залежність залишкової ентропії $S(T = 0, n, N) / (k_B N)$ від концентрації електронів $c = n/N$ для моделі Габбарда з інтегралами переносу $t_2 > 2t_1$ (дані для ланцюжка подвійних тетраедрів і трикутної трубки є однаковими).

На рис. 3. зображена залишкова ентропія моделі Габбарда $\lim_{T \rightarrow 0} S(T, n, N) = \ln g^N(n)$ як функція електронної концентрації $c = n/N$. Ця величина досягає свого максимуму $3 \ln 2 \approx 2.079$ при концентрації електронів $c = 5/4$. Більше того, вона рівна $\ln 3 \approx 1.099$ в точці $c = 2$. Кіральність локалізованих станів призводить до зростання залишкової ентропії: так для моделі Габбарда на ромбічному ланцюжку та на двоногій фрустрованій драбинці залишкова ентропія $S(T = 0, \mu = \mu_0, N) / (k_B N) = \ln 3 \approx 1.099$, в той час як на досліджуваних ланцюжках – $S(T = 0, \mu = \mu_0, N) / (k_B N) = 3 \ln 2 \approx 2.079$.

У роботі розглянуто також різні збурення вихідного гамільтоніану (1) або (2), що спричиняють зняття виродження за кіральністю. Для спінових систем таким збуренням може бути взаємодія Дзялошинського-Морії між спінами в трикутній пастці, а також деяка чотиривузлова взаємодія пар спінів з сусідніх комірок. Для моделі Габбарда такими додатковими взаємодіями будуть відповідно дія магнітного поля, що перпендикулярне до площини трикутника, та деякі чотиривузлові електрон-електронні взаємодії. За наявності нових типів збурення низькотемпературна фізика спінової або електронної моделей у підпросторах з $n = n_{\text{max}} = N$ магнонами або електронами може бути описана ефективним псевдоспін-

1/2 XX ланцюжком в поперечному полі.

У третьому розділі розглянуто модель Габбарда на дельтаподібному ланцюжку та двох типах ланцюжків кагоме див. рис 4. Попередні дослідження Мільке і Тасакі [A. Mielke and H. Tasaki // Commun. Math. Phys. – 1993 – Vol. 158. – Pp. 341-371] для моделі Габбарда на подібних ґратках акцентувались на вивченні плоскозонного феромагнетизму в основному стані. Застосовуючи концепцію локалізованих станів, ми описуємо детально не тільки магнітні властивості в основному стані, але і термодинаміку таких систем при низьких температурах у широкому інтервалі електронних концентрацій, як для скінченних так і для термодинамічно великих систем.

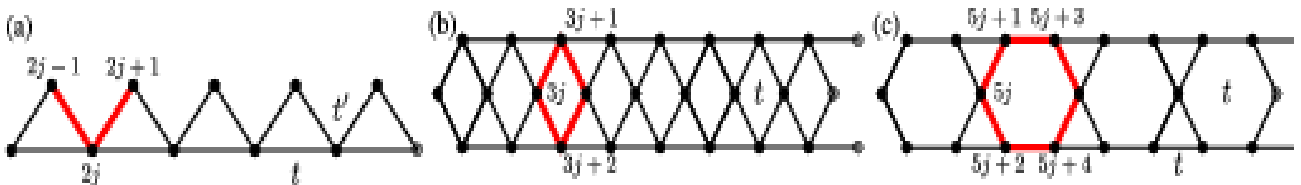


Рис. 4: Три ланцюжки, що досліджуються у розділі 3 дисертації: (а) дельтаподібний ланцюжок, (b) ланцюжок кагоме I і (c) ланцюжок кагоме II. Для дельтаподібного ланцюжка інтеграл переносу вздовж зубців ланцюжка t' є в $\sqrt{2}$ разів більшим за інтеграл переносу вздовж основи $t > 0$. Для ланцюжків кагоме усі інтеграли переносу $t > 0$ є однаковими. Жирні лінії відповідають мінімальним областям, в яких можуть існувати локалізовані електрони.

Для усіх трьох ланцюжків основні стани моделі Габбарда у підпросторах з $n = 0, 1, \dots, n_{\max}$ електронами можуть бути представлені, як локалізовані електронні стани, що мають енергію $n\epsilon_1$ і кратність виродження $g_{\mathcal{N}}(n)$. Якщо хімічний потенціал електронів μ матиме значення близьке до μ_0 ($\mu_0 \approx \epsilon_1 = 2t$ для всіх трьох ланцюжків), сконструйовані основні стани для $n = 0, 1, \dots, n_{\max}$ електронів, внаслідок того, що їх енергія найменша, а кратність виродження величезна, даватимуть найбільший внесок у велику канонічну статистичну суму при низьких температурах:

$$\begin{aligned} \Xi(T, \mu, N) &\approx \Xi_{GS}(T, \mu, N) \\ &= \sum_{n=0}^{n_{\max}} g_{\mathcal{N}}(n) e^{-\frac{n\epsilon_1}{T}} = \sum_{n=0}^{n_{\max}} g_{\mathcal{N}}(n) e^{\frac{n(\mu_0 - \mu)}{T}} = \sum_{n=0}^{n_{\max}} g_{\mathcal{N}}(n) z^n, \end{aligned} \quad (8)$$

де $z = e^x$ є активність, а $x = (\mu_0 - \mu)/T$. Користуючись методом матриці переносу, в термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ ми отримуємо універсальний вираз для $\Xi_{GS}(T, \mu, N)$

$$\Xi_{GS}(T, \mu, N) = \left(\frac{1}{2} + \sqrt{\frac{1}{4} + \exp \frac{2t - \mu}{T}} \right)^{2\mathcal{N}}, \quad (9)$$

який є справедливим для усіх трьох одновимірних ланцюжків. Різниця є лише у співвідношенні між кількістю комірок \mathcal{N} і об'ємом ґратки N : $\mathcal{N} = N/2$, $\mathcal{N} = N/3$, і $\mathcal{N} = N/5$ для дельтаподібного ланцюжка, ланцюжка кагоме I, і ланцюжка кагоме II.

Для дослідження феромагнетизму у основному стані розглядається оператор

$$\frac{S^2}{\mathcal{N}^2} = \frac{\frac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) + S^z{}^2}{\mathcal{N}^2}, S^+ = \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\downarrow}, S^z = \frac{1}{2} \sum_{i=1}^{\mathcal{N}} (c_{i,\uparrow}^\dagger c_{i,\uparrow} - c_{i,\downarrow}^\dagger c_{i,\downarrow}). \quad (10)$$

При $T = 0$ величина $\langle S^2 \rangle_n$ є усередненням S^2 за всім можливими виродженими основними станами для числа електронів n . Ця величина задовольняє нерівність

Якщо $\langle S^2 \rangle_n \mathcal{N}^2$ досягає максимального значення (див. (11)), ми кажемо, що основний стан для n електронів є повністю феромагнітним (насичений феромагнетизм). Ми обчислюємо $\langle S^2 \rangle_n$ використовуючи багатоелектронні локалізовані основні стани для концентрацій електронів $n \leq n_{\max}$, див. рис. 5. Наші результати не тільки підтверджують теореми Мільке та Тасакі для $n = n_{\max}$, але стосуються випадків $n < n_{\max}$. Хоча скінченні системи і можуть мати ненасичений феромагнетизм у основному стані, у термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ скінченна область концентрацій, для якої феромагнетизм виживає, обертається у $n/\mathcal{N} = 1$ (див. рис. 5).

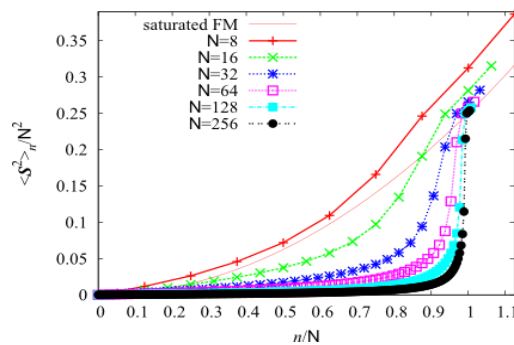


Рис. 5: Середній квадрат магнітного моменту ланцюжків кагоме $\langle S^2 \rangle_n \mathcal{N}^2$ як функція концентрації електронів n/\mathcal{N} для $\mathcal{N} = 8, 16, 32, 64, 128, 256$. Для феромагнітного основного стану $\langle S^2 \rangle_n \mathcal{N}^2$ у термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ прямував би до $(n/\mathcal{N})^2/4$ (тонка лінія).

У четвертому розділі розглядається модель Габбарда на двовимірній гратці Тасакі. На відміну від одновимірної моделі Тасакі (дельтаподібний ланцюжок, див. розділ 3), така система перебуватиме у феромагнітному основному стані у скінченній області концентрацій електронів $pf \leq p \leq 1$, де $p = n/\mathcal{N}$. Для доведення цього твердження Мільке і Тасакі розглянули задачу про перехід у феромагнітний основний стан у плоскостонних моделях, як фазовий перехід у задачі про перколяцію (протікання) за вузлами. Локалізовані електрони з плоскої зони утворюють феромагнітні кластери. При концентрації електронів, за якої можлива поява кластера, з розміром пропорційним до розмірів системи, основний стан моделі стає феромагнітним. Зауважимо, що виродження Крамерса кожного окремого кластера призводить до нового типу задачі про перколяцію – зваженої перколяції. У роботі

вперше, для обчислення спостережуваних величин, використовується формулювання задачі про феромагнетизм моделі Габбарда на гратці Тасакі у термінах задачі про зважену перколяцію, що досі не було зроблено. Зокрема, вперше було встановлено значення критичної точки *pf*.

Розглянемо стандартний гамільтоніан Габбарда (2) з одновузловим відштовхуванням на двовимірній квадратній гратці Тасакі, зображеній на рис. 6 (хоча запропонований підхід можна розвинути і до інших ґраток у двох вимірах: трикутній, шестикутній, тощо, а також у вимірності простору більшій за 2).

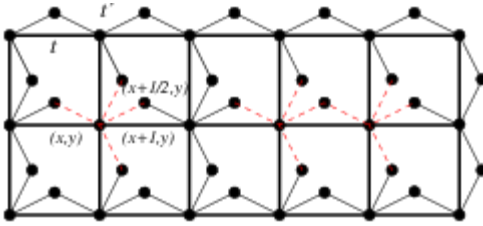


Рис. 6: Двовимірна гратка Тасакі. Інтеграли переносу вздовж жирних ліній $t > 0$, а для усіх інших взаємодій маємо $t' = 2t$. Мінімальна комірка-пастка з п'яти вузлів позначена пунктирними лініями. Число комірок на гратці – $\mathcal{N} = \mathcal{N}/3$, де \mathcal{N} число вузлів гратки.

Оператор породження локалізованого стану з енергією $\varepsilon_1 = -4t$ і спіном σ , що діятиме на вакуумний стан, можна записати наступним чином

$$l_{r,\sigma}^\dagger = c_{x-\frac{1}{2},y,\sigma}^\dagger + c_{x+\frac{1}{2},y,\sigma}^\dagger + c_{x,y-\frac{1}{2},\sigma}^\dagger + c_{x,y+\frac{1}{2},\sigma}^\dagger - 2c_{x,y,\sigma}^\dagger. \quad (12)$$

Такий стан існуватиме лише в обмеженій області гратки (див. рис. 6) – комірці-пастці r , а амплітуда хвильової функції $l_{r,\sigma}^\dagger |0\rangle$ дорівнюватиме нулю на усіх інших вузлах гратки. Багатоелектронний основний стан з числом електронів $0 \leq n \leq \mathcal{N}$, який матиме енергію $n\varepsilon_1$ можна збудувати, заповнюючи різні комірці-пастки гратки і беручи до уваги принцип Паулі. При цьому подвійне заповнення комірки є заборонене, а при заповненні двох сусідніх комірок електрони повинні мати однаковий спін. При заповненні сусідніх комірок локалізованими електронами з протилежним спіном $\sigma_r = -\sigma_{r+\vec{1}}$ (одичинний вектор $\vec{1} = (ex, 0)$ або $(0, ey)$) на спільному вузлі, в якому комірці дотикаються, у гру вступить відштовхування $U > 0$, і енергія такого стану зросте. Проте принцип Паулі дозволяє заповнення сусідніх комірок-пасток електронами з однаковим спіном σ . Такий стан не відчуватиме впливу $U > 0$ і залишатиметься основним. Електрони, що займають m комірок, що торкаються (формують m -вузловий феромагнітний кластер), мають перебувати у одному з $m + 1$ станів спін- $m/2$ мультиплету, які можна утворити, використовуючи $SU(2)$ симетрію і діючи оператором S^- на хвильову функцію електронів у такому кластері $l_{r_1,\uparrow}^\dagger \dots l_{r_m,\uparrow}^\dagger |0\rangle$. Якщо нам відома інформація про розподіл кластерів у певній геометричній конфігурації q , то можна записати кратність виродження n -електронного основного стану:

$$g_{\mathcal{N}}(n) = \sum_{q=1}^{\mathcal{C}_{\mathcal{N}}^n} W(q), W(q) = \prod_{i=1}^{M_q} (n_{q,i} + 1). \quad (13)$$

Тут індекс q відповідає різним геометричним конфігураціям n електронів на \mathcal{N} комірках. Для певної просторової конфігурації q , M_q відповідає числу кластерів, а $n_{q;i}$ – числу електронів у кластері з номером i . Зрозуміло, що $n_{q;1} + n_{q;2} + \dots + n_{q;M_q} = n$

Важливо зауважити, однак, що задача про перколяцію, яка виникає для локалізованих електронів на гратці Тасакі, не є задачею стандартної перколяції за вузлами. Тут ймовірність появи тієї чи іншої геометричної конфігурації q є пропорційною статистичній вазі $W(q)$ (див. рівняння (13)). Таким чином розрахунок середнього деякої величини Q_q здійснюється за формулою

$$\langle Q_q \rangle = \frac{1}{g_{\mathcal{N}}(n)} \sum_{q=1}^{C_{\mathcal{N}}^n} W(q) Q_q. \quad (14)$$

Ми називаємо таку перколяційну проблему – зваженою перколяцією, або, маючи на увазі електронну задачу з виродженням Крамерса – Паулі-скорельованою перколяцією. Внаслідок того, що $W(q) \neq 1$, ми очікуємо, що значення критичної концентрації pf , при якій настає протікання, буде зсунутим у область вищих концентрацій електронів у порівнянні з порогом для стандартної перколяції: $pf > pc \approx 0.59$.

Для аналізу феромагнетизму електронної моделі ми дослідили середній квадрат повного магнітного моменту $\langle S^2 \rangle / \mathcal{N}^2$ у системі об'ємом \mathcal{N} комірок, у якій є n електронів:

$$\langle S^2 \rangle = \frac{1}{g_{\mathcal{N}}(n)} \sum_{q=1}^{C_{\mathcal{N}}^n} W(q) \sum_{i=1}^{M_q} \frac{n_{q;i}}{2} \left(\frac{n_{q;i}}{2} + 1 \right) = \sum_{l=1}^n \mathcal{N} n(l) \frac{l}{2} \left(\frac{l}{2} + 1 \right). \quad (15)$$

Тут $n(l)$ – середнє число кластерів розміру l (нормоване на розмір системи \mathcal{N}),

$$n(l) = \frac{1}{g_{\mathcal{N}}(n)} \sum_{q=1}^{C_{\mathcal{N}}^n} W(q) n_q(l), \quad (16)$$

а $n_q(l)$ є число кластерів розміру l для геометричної конфігурації q .



Рис. 7: Кореляційна функція $g(l)$ для стандартної перколяції (тонка лінія) та зваженої перколяції (жирна лінія) при концентраціях $p = 0.7$ і $p = 0.99$.

В одновимірному випадку задача про зважену перколяцію розв'язується точно за

допомогою методу матриці переносу. Отримано наступний результат:

$$n(l) = \frac{4(1-p)^3}{(2-p)^2} (l+1)\alpha^l, \alpha = \frac{p}{2-p}; \quad (17)$$

$$\langle S^2 \rangle = \frac{3p(2-p)}{8(1-p)} \mathcal{N}. \quad (18)$$

Тут квадрат магнітного моменту $\langle S^2 \rangle$ обчислений у термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$, як функція числа електронів $n = p\mathcal{N}$. Ми можемо застосувати метод матриці переносу і для знаходження парної кореляційної функції заповнення вузлів $g(l) = \langle n_{i+l}n_i \rangle - \langle n_i \rangle \langle n_{i+l} \rangle = \langle n_{i+l}n_i \rangle - p^2$. Отримано:

$$g(l) = -(1-p)^2 \alpha^{2|l|} = -(1-p)^2 e^{-|l|/\xi} < 0, \quad (19)$$

де $\xi = -1/(2 \ln \alpha)$ (див. рис. 7), ξ поводить себе як $(pf-p)^{-1}$ при $p \rightarrow pf=1$. При цьому кореляційна функція $g(l)$ стає слабкою, але діє на великих відстанях. Для стандартної перколяції парна кореляційна функція є рівна нулю $g(|i-j|) = p(1-p)\delta_{i,j}$. Принцип Паулі призвів до ефективного "відштовхування" у перколяційній задачі.

У двовимірному випадку аналітичного розв'язку для зваженої перколяції не існує. Для аналізу зваженої перколяції у цьому випадку ми використали числові симуляції, аналізуючи квадрат магнітного моменту усієї системи $\langle S^2 \rangle$ та окремо найбільшого кластера $\langle S_{max.cluster}^2 \rangle$, ймовірність знайти охоплюючий кластер у системі P_{span} та нормоване число $n(l)$ кластерів розміру l . Деякі результати симуляцій представлено на рис. 8. Зауважимо, що різні величини дають те саме значення критичної концентрації $pf = 0.66 \pm 0.01$.

Підсумовуючи результати чисельних досліджень феромагнетизму основних станів у квадратній моделі Тасакі-Габбарда, приходимо до твердження, що при $T=0$ ця модель виявляє феромагнетизм у області електронних концентрацій $0.22 \dots \leq n/N \leq 1/3$.

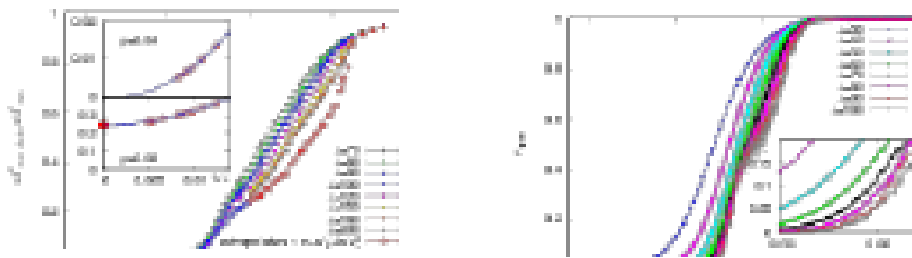


Рис. 8: а) Залежність квадрату магнітного моменту найбільшого кластера $M^2 = \langle S_{maxcluster}^2 \rangle / S_{max}^2$ від концентрації $p = n\mathcal{N}$ для двовимірної ґратки Тасакі. На вкладках зображено скінченнорозмірний скейлінг M^2 при концентраціях $p = 0.64$ (верхня вкладка) і $p = 0.68$ (нижня вкладка). б) Залежність ймовірності P_{span} (ймовірність знайти кластер, що охоплює систему) від $p = n\mathcal{N}$. У вкладці зображено область близьку до критичної точки. Очевидно, що при $p = 0.65$ значення P_{span} прямує до нуля у термодинамічній границі.

Основні результати та висновки

1. Розроблено концепцію кіральних локалізованих станів до обчислення низькотемпературних характеристик деяких сильно скорельованих моделей (антиферромагнетик Гайзенберга і стандартна модель Габбарда).
2. Через кіральність трикутної пастки для одночастинкових станів кратність виродження основного стану таких систем зростає, а низькотемпературна термодинаміка при малих концентраціях електронів чи сильних магнітних полях зазнає характерних змін. Так ефектами, що пов'язані з багатократно виродженими основними станами є додатковий низькотемпературний пік у теплоємності систем, та високе значення залишкової ентропії.
3. Додаткові взаємодії у таких спінових чи електронних системах можуть зняти високу кратність виродження, пов'язану з кіральністю трикутників-пасток. Ефективний опис нових моделей може бути здійснено з допомогою псевдоспін-1/2 XX ланцюжка у поперечному полі, де псевдоспін є пов'язаний з кіральністю трикутника.
4. Модель Габбарда на двох розглянутих у дисертації ланцюжках кагоме та дельтаподібному ланцюжку виявляє однакову низькотемпературну поведінку при малій концентрації електронів у термодинамічній границі $\mathcal{N} \rightarrow \infty$ (де \mathcal{N} – число комірок-пасток у гратці). Локалізовані стани призводять до характерного низькотемпературного піку у теплоємності та скінченного значення залишкової ентропії моделі Габбарда на таких ланцюжках.
5. Хоча ланцюжки кагоме скінченної довжини і проявляють ненасичений ферромагнетизм у широкому інтервалі (низьких) концентрацій електронів $n\mathcal{N} \leq 1$, у термодинамічній границі система є ферромагнітною лише при концентрації електронів $n\mathcal{N} = 1$.
6. Знайдено новий тип перколяційної проблеми – зважена перколяція за вузлами, що виникає у двовимірній моделі Тасакі-Габбарда при $T = 0$. Поріг протікання у зваженій перколяції pf співпадає з концентрацією електронів, при якій стається перехід у ферромагнітний основний стан моделі Габбарда на такій гратці.
7. За допомогою методу матриці переносу одновимірної задача про зважену перколяцію за вузлами розв'язана точно аналітично.
8. У двовимірному випадку задача про зважену перколяцію за вузлами проаналізована числовим методом. Для моделі Тасакі-Габбарда критична концентрація електронів, при якій стається ферромагнітний перехід $pf = nf\mathcal{N} = 0.66 \pm 0.01$, є більшою за критичну концентрацію для стандартної перколяції за вузлами на квадратній гратці $p \approx 0.5927$.

Результати дисертації опубліковано в роботах:

1. Low-temperature properties of the Hubbard model on highly frustrated one-dimensional lattices. / O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker et. al. // Physical Review B. 2010. Vol. 81. P. 014421.
2. Magnetic properties of the Hubbard model on kagome stripes / O. Derzhko, M. Maksymenko, J. Richter et.al. // Acta Physica Polonica A. 2010. Vol. 118. P. 736.
3. Maksymenko M. Low-temperature properties of quantum Heisenberg

- antiferromagnet on some one-dimensional lattices containing equilateral triangles / M. Maksymenko, O. Derzhko, J. Richter // Acta Physica Polonica A. 2011. Vol. 119. P. 860.
4. Maksymenko M. Localized states on triangular traps and low-temperature properties of the antiferromagnetic Heisenberg and repulsive Hubbard models / M. Maksymenko, O. Derzhko, J. Richter // The European Physical Journal B. 2011. Vol. 84. pp. 397-408.
 5. The flat-band ferromagnetic transition as a Pauli-correlated percolation transition / M. Maksymenko, A. Honecker, R. Moessner et.al. // Preprint ICMP. 2011. №ICMP-11-14E
 6. Максименко М. Низькотемпературні властивості моделі Габбарда на смужках кагоме при малих електронних густинах // IX Всеукраїнська Школа-семінар та конкурс молодих вчених у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, Україна: 2009, травень.
 7. Derzhko O. Towards thermodynamics of flat-band electron systems / O. Derzhko, M. Maksymenko // Statistical Physics: Modern Trends and Applications, Lviv (Ukraine), June 23-25, 2009: Programme and abstracts. Lviv-2009 - P. 188
 8. Exact many-electron ground states and low-temperature properties of the Hubbard model on two kagome-like chains / O. Derzhko, M. Maksymenko, J. Richter et. al. // International Conference on Magnetism ICM2009 July 26-31 Karlsruhe Germany, Program and abstracts, Congress Center Stadthalle Karlsruhe-2009. P. 224
 9. Максименко М. Низькотемпературна термодинаміка квантового антиферромагнетика Гайзенберга на деяких одновимірних ланцюжках з трикутними пастками // X Всеукраїнська Школа-семінар та конкурс молодих вчених у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, Україна: 2010, с. 32.
 10. Magnetic properties of the Hubbard model on kagome stripes / O. Derzhko, M. Maksymenko, J. Richter et. al. // 14-th Czech and Slovak Conference on Magnetism, Program and abstracts, Kosice-2010. P1-13
 11. Low-temperature properties of quantum Heisenberg antiferromagnet on some one-dimensional lattices containing equilateral triangles / M. Maksymenko, O. Derzhko, J. Richter // 14-th Czech and Slovak Conference on Magnetism, Program and abstracts, Kosice-2010, P1-19.
 12. Low-temperature properties of quantum Heisenberg antiferromagnet and Hubbard model on one dimensional lattices containing equilateral triangles / M. Maksymenko, O. Derzhko, J. Richter // QFS 2010 International Symposium on Quantum Fluids and Solids, August 1-7, 2010, Grenoble, France, List of contributions, p. 74
 13. Transition to ferromagnetic ground-states on the two-dimensional Tasaki-Hubbard model / M. Maksymenko, A. Honecker, J. Richter et. al. // MECO 36, April 5-7, 2011, Lviv, Ukraine, Book of abstracts
 14. Localized states on triangular traps and low-temperature properties of some strongly correlated lattice models / M. Maksymenko, O. Derzhko, J. Richter // MECO 36, April 5-7, 2011, Lviv, Ukraine, Book of abstracts
 15. М. Максименко Перехід у ферромагнітний основний стан у двовимірній моделі Тасакі-Габбарда // XI Всеукраїнська Школа-семінар та конкурс молодих вчених у галузі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, Україна: 2011, червень.

Анотація

Максименко М. В. Эффекты локализованных состояний в низкотемпературных свойствах квантовых решеточных систем. – Рукопись

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2012.

У дисертації вивчаються ефекти, що виникають у квантових ґраткових моделях на класі ґраток, в яких стається локалізація хвильової функції, спричинена геометрією ґратки. Застосовуючи концепцію локалізованих станів, можна дослідити багаточастинкові основні стани таких систем, які дають основний внесок у низкотемпературні властивості при сильних магнітних полях (квантовий антиферромагнетик Гайзенберга), або при певному значенні хімічного потенціалу (модель Габбарда).

Розвинено концепцію локалізованих станів для ґраток, в яких одночастинкова локалізована хвильова функція має додаткову ступінь вільності – кіральність. Досліджено низкотемпературну термодинаміку моделі антиферромагнетика Гайзенберга та моделі Габбарда на таких ґратках та ефекти, що пов'язані з кіральністю. При внесенні додаткових взаємодій, що знімають виродження за кіральністю, такі системи можуть бути ефективно описані за допомогою (псевдо)спін-1/2 XX ланцюжка у поперечному полі. Псевдоспін у цьому випадку є пов'язаний з кіральністю трикутника.

У дисертації розглянуто низкотемпературні властивості моделі Габбарда на двох ланцюжках кагоме. Отримано внесок локалізованих станів у термодинамічні величини за низьких температур і поблизу деякого значення хімічного потенціалу μ_0 (малі електронні густини). Досліджено магнітні властивості при $T = 0$ для числа електронів $n \leq \mathcal{N}$.

Досліджено перехід у феромагнітний основний стан моделі Габбарда на двовимірній ґратці Тасакі (квадратній), як перколяційний перехід у задачі про зважену перколяцію за вузлами. Показано, що у моделі Тасакі-Габбарда на квадратній ґратці основний стан є феромагнітним у області електронних концентрацій $0.22... \leq n/N \leq 1/3$.

Ключові слова: локалізовані стани, плоскі зони, плоскозонний феромагнетизм, точно розв'язувані проблеми

Аннотация

Максименко Н. В. Эффекты локализованных состояний в низкотемпературных свойствах квантовых решеточных систем. – Рукопись

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2012.

В диссертации рассматриваются эффекты, что возникают в квантовых решеточных моделях на классе решеток, в которых локализация волновой функции связана с геометрией решетки. Используя концепцию локализованных состояний, исследуются многочастичные основные состояния таких систем. Они играют основную роль в низкотемпературных свойствах при высоких магнитных полях (квантовый антиферромагнетик Гайзенберга) или при некотором значении химического потенциала (модель Хаббарда).

Развита концепция локализованных состояний для решеток, в которых одночастичная волновая функция имеет дополнительную степень свободы – киральность. Изучена низкотемпературная термодинамика и эффекты, связанные с киральностью в квантовом антиферромагнетике Гайзенберга и модели Хаббарда на таких решетках. Рассмотрены механизмы снятия вырождения за киральностью.

Рассмотрены низкотемпературные свойства модели Хаббарда на двух цепочках кагоме: низкотемпературная термодинамика при химическом потенциале близком к некоторому значению μ_0 (малые концентрации электронов) и магнитные свойства для числа электронов $n \leq \mathcal{N}$, где \mathcal{N} число ячеек, в которых может локализоваться волновая функция.

Изучен переход в ферромагнитное основное состояние модели Хаббарда на двухмерной решетке Тасаки, как перколяционный переход в задаче о взвешенной перколяции за узлами. Показано, что в двухмерной модели основное состояние ферромагнитное для области электронных концентраций $0.22... \leq n/N \leq 1/3$.

Ключевые слова: локализованные состояния, плоские зоны, плоскостонный ферромагнетизм, точно решаемые проблемы

Abstract

Maksymenko M. V. Localized-state effects in low-temperature properties of quantum lattice systems – Manuscript

Submitted for the degree of the candidate of physical and mathematical sciences, specialization 01.04.02 – theoretical physics. Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2012

The thesis concerns theoretical studies of localized-state effects arising in quantum lattice models on a highly frustrated lattices which support the dispersionless (flat) band as the lowest energy band in one-particle spectrum. In such models localization of the wave function is related to the geometry of the lattice.

Localized-state approach allows the construction of many-body states in such systems. These states give a main contribution to the low-temperature properties of the systems in high magnetic fields (quantum Heisenberg antiferromagnet) or for specific values of chemical potential (Hubbard model).

Firstly, the lattices with odd sites in trapping cells have been studied (double-tetrahedra chain and frustrated triangular tube). In such a case localized one-particle states, which are

localized within triangular traps, obtain additional degree of freedom – chirality of the triangle, which increase the degeneracy of such ground states. We study the effect of chirality on low-temperature thermodynamic of quantum Heisenberg antiferromagnet and Hubbard model as well as the effects of additional interactions which may lift the degeneracy due to chirality. In particular, in the presence of additional interactions our models can be mapped onto a (pseudo)spin-1/2 XX chain in a transverse field, where pseudospin is related to the chirality.

Secondly, we have studied the low-temperature properties of the Hubbard model on two kagome chains. In particular we have found analytically the contribution of localized states to the low-temperature thermodynamics of the full model in the vicinity of the chemical potential $\mu = \mu_0$. Due to the existence of localized states the considered systems exhibits a finite value of residual entropy and low-temperature peaks in the temperature dependence of the specific heat. We also studied the ground-state magnetic properties of the models for the low electron fillings $n \leq \mathcal{N}^{-1}$, where \mathcal{N} is the number of trapping cells in the chains. We showed that in thermodynamic limit the system is in ferromagnetic ground state only for the electron concentration $n\mathcal{N} = 1$.

Finally we study the para-ferromagnetic transition of the standard Hubbard model on a two-dimensional Tasaki lattice. It is known that flat-bands yield a route to ferromagnetism in the Hubbard model, but the actual location and nature of the transition remain unknown. For the electron densities $n \leq \mathcal{N}^{-1} = 1/3$ many-electron ground states on square-lattice Tasaki-Hubbard model can be constructed from localized states. In order to avoid the on-site Hubbard repulsion and satisfy the Pauli principle clusters of connected localized electrons are ferromagnetic. This problem can be analyzed as a new "weighted" percolation problem where due to the Kramers degeneracy different cluster coverings obtain different weights. We provide an exact solution for the corresponding one-dimensional case and a numerical algorithm for the square-lattice case of the new percolation problem. In two dimensions the para-ferro transition takes place at concentration $n\mathcal{N} = 0.66 \pm 0.01$ which is well above the threshold for the standard percolation transition $p_c \approx 0.59$. Moreover, there exists a region above p_f where ferromagnetism is unsaturated.

Keywords: localized states, flat bands, flat-band ferromagnetism, exactly solvable problems

Підписано до друку 15.05.2012. Формат 60з84/16.

Папір друкарський. Ум. друк. арк. 0,9.

Зам. № 31. Наклад 100 пр.

Видавництво “ПАІС“

Реєстраційне свідоцтво ДК № 3173 від 23 квітня 2008 р.

вул. Гребінки 5, оф. 1, м. Львів, 79007

тел.: (032) 225-60-14, (032) 272-83-98

e-mail: pais@mail.lviv.ua; <http://www.pais.com.ua>