

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

ВЕРХОЛЯК Тарас Михайлович



УДК 536.93; 536.96; 538.9

**КВАНТОВІ ФЛУКТУАЦІЇ ТА ФРУСТРАЦІЇ  
У НИЗЬКОВИМІРНИХ СПІНОВИХ МОДЕЛЯХ:  
ТОЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ І ПЕРТУРБАТИВНИЙ АНАЛІЗ**

01.04.02 — теоретична фізика

Автореферат  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
доктора фізико-математичних наук

Львів — 2024

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України

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

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор **Гомонай Олена Василівна**, Університет Йоганна Гутенберга (м. Майнц, Німеччина), старший науковий співробітник Інституту фізики;

доктор фізико-математичних наук, старший науковий співробітник **Кузян Роман Оганесович**, Інститут проблем матеріалознавства ім. І.М.Францевича НАН України (м. Київ), провідний науковий співробітник відділу функціональних оксидних матеріалів;

доктор фізико-математичних наук, старший дослідник **Сотніков Андрій Геннадійович**, Національний науковий центр «Харківський фізико-технічний інститут» НАН України (м. Харків), провідний науковий співробітник відділу статистичної фізики і квантової теорії поля.

Захист відбудеться 22 січня 2025 р. о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:  
79011, м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

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

Автореферат розіслано 20 грудня 2024 р.

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



А.М. Швайка

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** У низьковимірних магнетиках зі спіном  $1/2$  квантові ефекти відіграють вирішальну роль у їх поведінці при низьких температурах. Основний стан одновимірних моделей зазвичай відповідає неупорядкованій фазі квантової спінової рідини, яка характеризується відсутністю локального порядку, степеневим загасанням кореляцій і безщільним спектром збуджень. Ця властивість відображається зокрема у появі дробових елементарних збуджень. Наявність конкурентних взаємодій, які є причиною фрустрації у магнітних системах, призводить до виникнення нових фізичних явищ і фаз, як, наприклад, спонтанне порушення просторової симетрії, або плато дробової намагніченості у магнітному полі.<sup>1</sup>

Робота присвячена теоретичному опису квантових магнітних систем малої просторової вимірності, які демонструють складну структуру основного стану. Зокрема, ми зосередилися на дослідженні динамічних властивостей спін- $1/2$  ХУ ланцюжків та особливостях їх низькотемпературної поведінки. Обчислення та аналіз часових кореляційних функцій є складною проблемою у низьковимірних квантових спінових моделях, оскільки квантові флуктуації зазвичай руйнують класичний порядок і призводять до появи дробових елементарних збуджень, що проявляється у появі протяжних частотних профілів у динамічних структурних факторах і відповідних динамічних сприйнятливостях. Вплив анізотропії, антисиметричної взаємодії Дзялошинського-Морія та інших факторів на ці характеристики важко наперед передбачити. Ці ефекти можна спостерігати у експериментах з електронного спінового резонансу<sup>2</sup> та непружному розсіянню нейтронів<sup>3</sup> у відповідних магнітних матеріалах, з яких й можна відтворити їхні динамічні характеристики. Розрахунок та аналіз частотних залежностей динамічних структурних факторів і сприйнятливостей та інтерпретація відповідних експериментальних даних є складною проблемою в сучасній теорії. В останні роки прогрес числових методів, як DMRG, тензорні мережі, дозволив отримати динамічні спектри для достатньо довгих ланцюжків. З іншого боку, розвиток аналітичних підходів та отримання точних результатів може дати розуміння механізмів спостережуваних явищ.

Фрустровані моделі залишаються гарячою темою досліджень протягом останніх років, оскільки конкуренції взаємодій в низьковимірних системах можуть призводити до появи сильноскорельованих квантових фаз зі складною структу-

---

<sup>1</sup>C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila, Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory, Springer Series in Solid-State Sciences, Vol. 164 (Springer Berlin Heidelberg, 2011).

<sup>2</sup>Y. Ajiro, Journal of the Physical Society of Japan **72**, 12 (2003).

<sup>3</sup>I. A. Zaliznyak, J. M. Tranquada, "Neutron Scattering and Its Application to Strongly Correlated Systems," in Strongly Correlated Systems: Experimental Techniques, edited by A. Avella and F. Mancini (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2015) pp. 205–235.

рою, і теоретичне дослідження таких систем є складною проблемою. Для числових методів, зокрема у випадку двовимірних систем, ефекти скінченного розміру часто стають особливо важливими при дослідженні систем з сильними квантовими кореляціями, які слабо загасають із відстанню. З іншого боку, квантовий метод Монте-Карло, який дозволяє вивчення систем більшого розміру, не застосовний у випадку фрустрованих моделей через так звану “проблему знаку”. Аналітичні ж підходи до систем без локального порядку, як у згаданих моделях, потребують нових наближень. При цьому точні результати для згаданих моделей відіграють важливу роль, оскільки дозволяють отримати прозору картину явищ, хоч і для спрощеної моделі. На жаль, число таких результатів є обмеженим у випадку фрустрованих систем.<sup>4</sup>

**Зв’язок роботи з науковими програмами, планами, темами.** Дисертаційна робота виконана в Інституті фізики конденсованих систем НАН України, із науковою тематикою якого пов’язаний вибраний напрямок досліджень. Подані в дисертації результати отримані згідно планів робіт у рамках бюджетних тем НАН України “Вплив молекулярної структури і процесів локального впорядкування на фізичні властивості багаточастинкових систем” (2014–2018 рр., номер держреєстрації 0114U001048), “Процеси впорядкування і властивості багаточастинкових статистичних систем: Теорія і комп’ютерне моделювання” (2019–2023 рр., номер держреєстрації 0119U100663), а також у рамках тем “Розробка сучасних теоретичних методів та їх застосування до вивчення властивостей конденсованих систем” (2002–2006 рр., номер держреєстрації 0102U001794), “Розвиток і застосування методів аналітичної теорії та комп’ютерного експерименту для опису явищ переносу в іон-електронних системах” (2007–2011 рр., номер держреєстрації 0107U002081), “Багатомасштабність і структурна складність конденсованої речовини: теорія і застосування” (2012–2016 рр., номер держреєстрації 0112U003119), “Нові концепції статистичного опису і їх застосування у теорії багаточастинкових систем” (2017–2021 рр., номер держреєстрації 0117U002093), гранту NATO collaborative linkage grant № CBP.NUKR.CLG 982540 “Dynamic Probes of Low-Dimensional Quantum Magnets” (2007-2008), грантів Національної стипендіальної програми Словацької Республіки (2008, 2011, 2014, 2020, 2021–2022), гранту ЄС через проєкт EURIZON H2020, грантова угода 871072, #EU-3025 “Frustrated quantum spin models to explain the properties of magnets over wide temperature range” (2024), проєкту Національного фонду досліджень України № 2023.03/0063 “Фрустровані квантові магнетики за різних зовнішніх умов” (2024).

**Мета і завдання дослідження.** *Метою дисертаційної роботи* є теоретичні дослідження динамічних та низькотемпературних явищ у низьковимірних

---

<sup>4</sup>S. Miyahara, “Exact Results in Frustrated Quantum Magnetism,” in Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory, edited by C. Lacroix, P. Mendels, F. Mila (Springer Berlin Heidelberg, Berlin, Heidelberg, 2011) pp. 513–536.

системах за допомогою точних методів та пертурбативних підходів. Для досягнення даної мети у дисертації необхідно було розв'язати наступні *завдання*:

1. Проаналізувати вплив різного типу анізотропії та неоднорідності на динамічні властивості  $XU$  ланцюжків на основі точних аналітичного та числового підходів.
2. Застосувати перетворення Йордана-Вігнера та наближення Гартрі-Фока для одновимірних фрустрованих моделей.
3. Отримати строгі результати для квантової спінової двонової драбинки зі взаємодіями Гайзенберґа та Ізинґа.
4. Отримати точні розв'язки для ортогонально-димерних моделей у одному та двох вимірах.
5. Пертурбативно врахувати квантову  $XU$  частину міждиммерних взаємодій для одно- та двовимірних ортогонально-димерних моделей та описати відповідні експерименти.
6. Дослідити низьковимірні моделі на декорованих ґратках у межах строгих підходів та ефективних моделей для опису низькотемпературної термодинаміки.

*Об'єктом дослідження* дисертаційної роботи є низьковимірні моделі квантових магнітних систем, що враховують наявність неоднорідності, анізотропії, фрустрації, ефектів скінченного розміру. *Предметом дослідження* є вплив вищезгаданих особливостей моделей на їхній основний стан, термодинамічні та динамічні властивості при низьких температурах.

**Методи дослідження.** У роботі застосовується метод ферміонізації на базі перетворення Йордана-Вігнера, що дозволяє знайти точні результати для динамічних характеристик спін-1/2  $XU$  ланцюжків. Одновимірні фрустровані моделі ( $J_1 - J_2$  і ромбічний ланцюжки) розраховуються методом Гартрі-Фока для гамільтоніанів безспінових ферміонів. Метод унітарних перетворень використовується, щоб звести гібридні моделі Ізинґа-Гайзенберґа до “класичної” форми моделі Ізинґа. Моделі на декорованих ґратках, розглядаються за допомогою декоративно-ітераційного перетворення, яке дозволяє отримати ряд строгих результатів для їх термодинамічних властивостей. У випадку, коли аналітичні методи не були доступні, застосовувались числові підходи: точна діагоналізація, метод ренормгрупи для матриці густини, квантовий метод Монте-Карло.

**Наукова новизна отриманих результатів.** Вперше отримано точні результати для динамічних властивостей  $XU$  ланцюжків та проаналізовано вплив симетричної та антисиметричної анізотропії взаємодії на динамічний структурний фактор моделі. Виявлено, що  $zz$  динамічний структурний фактор може демонструвати сингулярності ван Гова не лише з показником 1/2, а також з 2/3.

Отримано точні результати для динамічних структурних факторів періо-

дичних та випадкових ланцюжків, де неоднорідність задається знаком обмінної взаємодії, та показано, що випадковість змінює загасання кореляцій зі степеню до експоненційної.

Для зигзагоподібного та ромбічного ланцюжків показано, що метод середнього поля для ферміонізованої моделі, дає точний результат для випадку, який відповідає синглет-димерному основному стану з короткосяжними кореляціями.

Знайдено точний розв'язок для спін-1/2 фрустрованої двонової драбинки Ізинґа-Гайзенберґа та досліджено фази основного стану.

Отримано точний результат для одно- та двовимірної ортогонально-димерної моделі з взаємодіями Гайзенберґа та Ізинґа. Запропоновано теорію збурень для врахування квантової ХУ частини міждиммерної взаємодії. Продемонстровано, що такий підхід дає добре узгодження з точними та числовими симуляціями вже у другому порядку теорії збурень.

Досліджено квантовий спін-1/2 октаедричний ланцюжок, а також його аналог зі змішаними спінами 1 і 1/2; знайдено фазові діаграми моделей та встановлено квантові фази зі складною структурою.

Для моделі Гайзенберґа на ромбічно-декорованій квадратній ґратці ідентифіковано лінії квантових фазових переходів першого роду між феримагнітною фазою Ліба-Матіса і мономер-димерною фазою, які закінчуються лінією критичних точок при скінченних температурах.

Запропоновано спрощену модель Ізинґа-Гайзенберґа на ромбічно-декорованій квадратній ґратці, яка дозволяє знайти точний розв'язок для ліній фазових переходів першого роду та строго дослідити лінію критичних точок.

Виявлено, що спін-електронна модель на подвійно-декорованій ґратці з Ізинґовими спінами на основних вузлах і делокалізованими електронами на парі декорованих вузлів демонструє немонотонну залежність від інтегралу переносу та Кулонового відштовхування електронів для температури переходу до антиферомагнітного впорядкування.

**Практичне значення отриманих результатів.** Отримані в дисертаційній роботі аналітичні та чисельні результати прояснюють особливості динамічної поведінки та низькотемпературної термодинаміки квантових магнетиків різного типу у випадку анізотропії, регулярної чи випадкової неоднорідності, фрустрації та зовнішнього магнітного поля. З практичної точки зору вони можуть бути використані для пояснення експериментів електронного парамагнітного резонансу та розсіяння нейтронів.

Робота має також методологічне значення. Метод розрахунку заснований на пертурбативному врахуванні квантової ХУ частини міждиммерних взаємодій може бути використаний для досліджень великої кількості сполук з димерною структурою.

Результати отримані для полімерної координаційної сполуки  $[\text{Cu}_2\text{Dy}_2]_n$  та квазідвовимірною магнітного матеріалу  $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$  пояснюють їх властивості в межах аналітичного підходу.

**Особистий внесок здобувача.** У роботах, виконаних спільно зі співавторами [1–31], здобувачу належить:

- обчислення  $xx$  динамічного структурного фактора [1, 2, 5];
- обчислення  $zz$  динамічного структурного фактора [3, 4];
- аналітичний розрахунок  $xx$  динамічних структурних факторів для регулярно і випадково неоднорідних  $XU$  ланцюжків [7, 8];
- постановка задачі про метод середнього поля для ферміонізованого гамільтоніану та розрахунки в такому наближенні [6, 10, 12];
- постановка задачі про точний розв'язок моделі Ізинґа-Гайзенберґа на двоногій драбинці та отримання точного розв'язку [14, 15];
- аналітичний розрахунок критичних поведінки магнетоелектрика Ізинґа-Гайзенберґа на двоногій драбинці [25];
- постановка задачі про точний розв'язок для ортогонально-димерної моделі Ізинґа-Гайзенберґа на одно- та двовимірних ґратках [16, 19];
- формулювання ефективної моделі для опису низькотемпературної термодинаміки ортогонально-димерного ланцюжка [18];
- формулювання теорії збурень для квантової  $XU$  частини міждимерної взаємодії для моделей з сильною взаємодією всередині димерів [20, 27, 28];
- розрахунки ефективної моделі Ізинґа для спин-електронної моделі з декорованими вузлами [9, 11, 13];
- аналіз фазової діаграми основного стану змішаного октаедричного ланцюжка [23];
- формулювання ефективних моделей для низькотемпературної термодинаміки ромбічного та октаедричного ланцюжків [21, 22, 29];
- отримання фазової діаграми для класичного варіанту моделі Гайзенберґа на квадратній ґратці декорованій ромбами [30];
- ефективний опис критичної поведінки моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці декорованій ромбами [30, 31].

В усіх роботах здобувач брав активну участь на всіх етапах виконання теоретичних досліджень, включаючи постановку завдання, вибір методів, виконання як аналітичних так і, особливо, числових розрахунків, обробці отриманих результатів та формулюванні висновків.

**Апробація роботи.** Основні результати дисертаційної роботи доповідались і обговорювались на таких наукових зустрічах: 12th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG04 (Košice, Slovakia, 2004); SCES'05: Strongly Correlated Electron Systems (Vienna, Austria, 2005); STM7, Small Triangle Meeting (Snina, Slovakia,

2005); Statistical Physics 2005: Modern Problems and New Applications (Lviv, Ukraine, 2005); 13th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG07 (Košice, Slovakia, 2007); Statistical Physics: Modern Trends and Applications (Lviv, Ukraine, 2009); International Conference on Magnetism ICM 2009 (Karlsruhe, Germany, 2009); 14th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG10 (Košice, Slovakia, 2010); 4-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications (Lviv, Ukraine, 2012); 15th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG13 (Košice, Slovakia, 2013); 16th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG16 (Košice, Slovakia, 2016); International Workshop Flatband Networks in Condensed Matter and Photonics (Daejeon, South Korea, 2017); International 11th Workshop on Current Problems in Physics (Lviv, Ukraine, 2018); Trends in Quantum Magnetism (Bad Honnef, Germany, 2018); 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends & Applications (Lviv, Ukraine, 2019); 17th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG19 (Košice, Slovakia, 2019); Workshop on Quantum Magnetism: Theoretical Challenges and Future Perspectives (Košice, Slovakia, 2019); III Workshop on Quantum Low-Dimensional Magnetism (Belo Horizonte, Brasil, 2021); IV Workshop on Quantum Low-Dimensional Magnetism (Maceio, Brasil, 2022); 1st Workshop on Perspective Electron Spin Systems for Future Quantum Technologies (Košice, Slovakia, 2022); Різdv'яні дискусії на кафедрі теоретичної фізики Львівського національного університету ім. І. Франка (2012); а також на семінарах Інституту фізики Університету Дортмунда (Німеччина), кафедри теоретичної фізики та астрофізики Університету П.Й. Шафарика у Кошицях (Словаччина) та Інституту фізики конденсованих систем НАН України.

**Публікації.** За матеріалами дисертації опубліковано 31 статтю в наукових журналах, внесених до переліку наукових видань, у яких мають бути опубліковані матеріали дисертаційних досліджень [1–31], і 21 теза конференцій [32–52].

**Структура та об'єм дисертації.** Дисертаційна робота складається із переліку умовних скорочень, вступу, семи розділів основної частини, загальних висновків, списку використаних джерел з 389 найменувань, 2 додатків і містить 96 рисунків. Робота викладена на 300 сторінках (зі списком використаних джерел і додатками — 352 сторінок).

## ОСНОВНИЙ ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** з'ясовано актуальність, сформульовано мету і завдання дослідження, відзначено його наукову новизну і практичне значення, визначено особистий внесок здобувача, наведено інформацію про апробацію результатів дисертації.

У **першому розділі** здійснено огляд літератури, де основна увага була зосереджена на квантових властивостях низьковимірних систем та впливі фру-



страції на їхню поведінку у магнітному полі та при низьких температурах. Крім того перераховано найважливіші теоретичні підходи щодо їх опису, а також наявні труднощі та нерозв'язані проблеми.

Квантові спінові моделі локалізованих магнітних моментів, які описують магнетоактивні діелектрики, є найпростішим класом сильноскорельованих систем, що можуть демонструвати складну поведінку. Особливо цікавими виглядають низьковимірні системи, де ефекти впорядкування послаблюються низьким координаційним числом одно- та двовимірних ґраток. Для цих випадків існує низка строгих результатів, які заперечують існування впорядкованих станів. Найвідоміша з них — теорема Мерміна-Вагнера, яка доводить, що неперервна симетрія не може бути порушена в системах з короткосяжними взаємодіями у розмірності простору  $D \leq 2$  при відмінних від нуля температурах.<sup>5</sup> Як наслідок відсутнього порядку, в одновимірних квантових системах може реалізуватись в основному стані стан квантової спінової рідини.<sup>6</sup> Квантова спінова рідина — це сильноскорельований стан спінової системи, в якому, проте, відсутній будь-який локальний порядок. Внаслідок сильних квантових флуктуацій властивості основного стану низьковимірних магнетиків можуть суттєво залежати від типів та конфігурацій наявних взаємодій.

У **другому розділі** отримано точні результати для динаміки спін-1/2 ХУ ланцюжків та вивчено вплив симетричної та антисиметричної анізотропії на динамічний структурний фактор моделі. Для випадку ізотропного ХХ ланцюжка проаналізовано зміни спектра поглинання електронного спінового резонансу за наявності взаємодії Дзялошинського-Морія. Встановлено, що антисиметрична взаємодія Дзялошинського-Морія може призводити до сингулярностей ван Гова з різними показниками у динамічному структурному факторі.

Модель, яка досліджується, задається на одновимірній ґратці з  $N \rightarrow \infty$  спінів 1/2 таким гамільтоніаном

$$H = \sum_{n=1}^N J (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + \sum_{n=1}^N D (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x) - \sum_{n=1}^N h s_n^z, \quad (1)$$

де  $s^\alpha$  — половини матриць Паулі,  $J$  — ХХ обмінна взаємодія,  $D$  — взаємодія Дзялошинського-Морія, а  $h$  — поперечне магнітне поле. У моделі (1) накладаються періодичні граничні умови (в аналітичних розрахунках) і вільні граничні умови (в числових розрахунках) маючи на увазі, що результати нечутливі до накладених граничних умов у термодинамічній границі  $N \rightarrow \infty$ .

У нашому дослідженні важливу роль відіграє калібрувальне перетворення, що усуває взаємодію Дзялошинського-Морія з гамільтоніана (1) за рахунок

<sup>5</sup>N. D. Mermin, H. Wagner, Phys. Rev. Lett. **17**, 1133 (1966); Phys. Rev. Lett. **17**, 1307 (1966).

<sup>6</sup>L. Savary, L. Balents, Rep. Prog. Phys. **80**, 016502 (2016).

перенормовання  $XX$  взаємодії. Це неоднорідне перетворення повороту спінів записуємо у такому вигляді

$$\begin{aligned}\tilde{s}_n^x &= s_n^x \cos \phi_n + s_n^y \sin \phi_n, & \tilde{s}_n^y &= -s_n^x \sin \phi_n + s_n^y \cos \phi_n, & \tilde{s}_n^z &= s_n^z, \\ \phi_n &= (n-1)\varphi, & \tan \varphi &= \frac{D}{J}.\end{aligned}\quad (2)$$

За допомогою перетворення (2) знаходимо новий гамільтоніан (1)

$$H = \sum_{n=1}^N \tilde{J} (\tilde{s}_n^x \tilde{s}_{n+1}^x + \tilde{s}_n^y \tilde{s}_{n+1}^y) - \sum_{n=1}^N \tilde{s}_n^z, \quad \tilde{J} = \text{sgn}(J) \sqrt{J^2 + D^2}. \quad (3)$$

Останній вираз відповідає моделі без взаємодії Дзялошинського-Морія, проте, з перенормованою  $XX$  взаємодією  $\tilde{J}$ . Надалі, ми використовуємо відомі результати для моделі (3), щоб розрахувати динамічні властивості моделі з взаємодією Дзялошинського-Морія (1), застосовуючи перетворення поворотів (2). Звідси очевидно, що взаємодія Дзялошинського-Морія не може бути виявлена з вимірювань термодинамічних величин оскільки ці величини не можуть розрізнити моделі (1) і (3), котрі пов'язані унітарним перетворенням (2).

Використовуючи перетворення (2), знаходимо співвідношення між  $xx$  і  $xy$  динамічними структурними факторами моделі (1) (ліва сторона рівнянь (4), (5)) і  $xx$  і  $xy$  динамічними структурними факторами моделі (3) (права сторона рівнянь (4), (5))

$$S_{xx}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2} [S_{xx}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} + S_{xx}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} + i(S_{xy}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} - S_{xy}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}})], \quad (4)$$

$$S_{xy}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2} [S_{xy}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} + S_{xy}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} - i(S_{xx}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} - S_{xx}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}})]. \quad (5)$$

Надалі можна використовувати рівняння (4) і (5) і давно відомі результати для динаміки моделі (3), щоб дослідити вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на  $xx$  і  $xy$  динаміку (частково аналітично і частково числовим методом). З результатів досліджень можна зробити висновок, що  $xx$  і  $xy$  динамічні структурні фактори моделі (1), при скінченних температурах виявляють ряд особливостей, а саме, асиметрію відносно  $\kappa \rightarrow -\kappa$  при  $h \neq 0$ , специфічну структуру частотних профілів при фіксованих значеннях  $\kappa$ , незалежні від поля положення м'яких мод, які можна використовувати для однозначного визначення взаємодії Дзялошинського-Морія.

Результати для динамічних структурних факторів можуть бути використані для обговорення впливу взаємодії Дзялошинського-Морія на поглинання енергії в ESR експериментах. Розгляньмо ESR експеримент у стандартній конфігурації Фарадея, в якому статичне магнітне поле, спрямоване вздовж осі  $z$

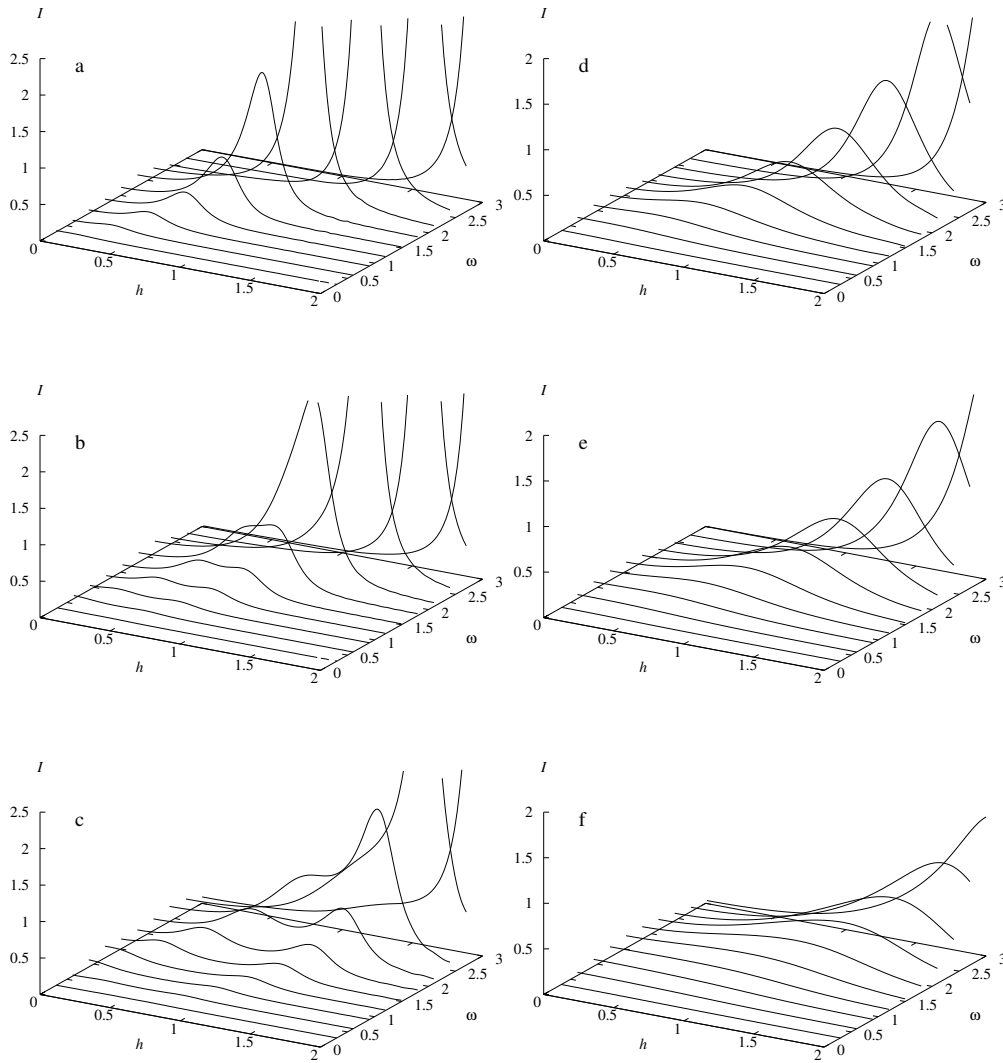


Рис. 1. Низькотемпературна (ліві панелі a, b, c) і проміжна температура (праві панелі d, e, f) інтенсивність поглинання  $I(\omega)$  на різних частотах  $\omega$  і магнітних полях  $h$  для спін-1/2  $XX$  ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія.  $J = 1$ ,  $D = 0$  (a, d),  $D = 0.5$  (b, e),  $D = 1$  (c, f),  $\beta = 5$  (ліві панелі a, b, c),  $\beta = 1$  (праві панелі d, e, f).

і електромагнітна хвиля з поляризацією в напрямку  $\alpha \perp z$  (скажімо,  $\alpha = x$ ) прикладені до магнетика, який описується спін-1/2  $XX$  ланцюжком із взаємодією Дзялошинського-Морія. У такому ESR експерименті вимірюють інтенсивність поглинання випромінювання  $I(\omega)$  як функцію статичного магнітного поля при різних частотах  $\omega > 0$  електромагнітної хвилі, яка у рамках теорії лінійного відгуку пропорційна до динамічного структурного фактора і, отже, наші результати для  $S_{xx}(\kappa, \omega)$  можна використати для обчислення ESR поглинання  $I(\omega)$  спін-1/2  $XX$  ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія. Надалі ми обмежуємось антиферромагнітним знаком  $XX$  обмінної взаємодії  $J > 0$ . На рис. 1 показано типову залежність інтенсивності поглинання  $I(\omega)$  при фіксованій частоті  $\omega$  у прикладеному статичному магнітному полі  $h$ , отриману числовим методом для ланцюжка з  $N = 400$  вузлів. Результати стосуються низьких (ліворуч) і проміжних (право-

руч) температур. Вони демонструють зміни в поглинанні зі зростанням  $D$  (згори донизу).

Зокрема, при наявності взаємодії Дзялошинського-Морія польова залежність інтенсивності поглинання при низьких температурах в певному діапазоні частот може мати двопікову структуру (порівняймо рис. 1(a), 1(b), 1(c)). Це пов'язано з розглянутим вище розщепленням двоферміонного континууму збуджень, вздовж характерних ліній якого переважно зосереджений  $xx$  динамічний структурний фактор.

Ми отримали детальні динамічні структурні фактори  $S_{\alpha\alpha}(\kappa, \omega)$ ,  $\alpha = x, y, z$  спін-1/2 анізотропного ХУ ланцюжка в поперечному полі із взаємодією Дзялошинського-Морія. Взаємодія Дзялошинського-Морія призводить до нетривіальних змін в динамічних величинах. Двоферміонні збудження, які виключно керують динамічним структурним фактором  $zz$ , утворюють три континууми збуджень і всі вони проявляються навіть при нульовій температурі для достатньо великої константи взаємодії Дзялошинського-Морія. Двоферміонні динамічні величини мають ненульові значення в обмеженій області площини  $\kappa-\omega$ ; вони можуть демонструвати сингулярності ван Гова не лише з показником 1/2, а й 2/3. Крім того, вони можуть зазнавати скінченних стрибків при нульовій температурі. Хоча динамічні структурні фактори  $xx$  і  $yy$  включають багатоферміонні збудження, двоферміонні збудження домінують у їх поведінці при низьких температурах: при низьких температурах ці величини демонструють кілька розмитих гілок збуджень, які відповідають конкретним лініям двоферміонних континуумів збуджень.

У **третьому розділі** досліджено періодичні та випадкові ланцюжки, де неоднорідність задається знаком обмінної взаємодії. Показано, що випадковість обмінної взаємодії змінює поведінку  $xy$  кореляційних функцій зі степеневі на експоненційно загасаючу. Пояснено, як це впливає на динамічний структурний фактор випадкових моделей.

Ми розглядаємо гамільтоніан неоднорідної одновимірної спін-1/2 ХХ моделі із білінійною взаємодією між найближчими сусідами, який можна точно дослідити за допомогою перетворення Йордана-Вігнера:

$$H = \sum_n (J_n (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + D_n (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x) + \Omega s_n^z), \quad (6)$$

де  $J_n$  — обмінна ХХ взаємодія між сусідніми вузлами  $n$  і  $n+1$ ,  $D_n$  —  $z$ -компонента взаємодії Дзялошинського-Морія між цими вузлами,  $\Omega$  — зовнішнє поперечне магнітне поле. Сума в (6) береться за всіма  $N$  вузлами; граничні умови (періодичні або відкриті) не є істотними для розглянутих нижче величин, які обчислюються в термодинамічній границі  $N \rightarrow \infty$ .

Спочатку розглянемо спінову модель (6), припускаючи  $J_n = \lambda_n J$  з  $\lambda_n =$

$\pm 1$  і  $D_n = 0$ , тобто обмінна взаємодія між спінами на вузлах  $n$  і  $n + 1$  може бути або антиферромагнітною, якщо  $\lambda_n J > 0$ , або ферромагнітною, якщо  $\lambda_n J < 0$  залежно від заданої послідовності  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ . Якщо здійснити калібрувальне перетворення

$$\begin{aligned} s_n^x &\rightarrow \tilde{s}_n^x = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{n-1} s_n^x, \\ s_n^y &\rightarrow \tilde{s}_n^y = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{n-1} s_n^y, \\ s_n^z &\rightarrow \tilde{s}_n^z = s_n^z, \end{aligned} \quad (7)$$

початковий гамільтоніан  $H$  перетворюється на гамільтоніан  $\tilde{H}$  однорідної моделі з обмінною константою  $J_n \equiv J$  (з точністю до несуттєвого граничного доданка). Величини, що відносяться до перетвореної (однорідної) моделі, виділяємо тильдою. Очевидно, що  $zz$  динамічна структурний фактор, як і всі термодинамічні величини, інваріантні відносно калібрувального перетворення (7), і тому не залежать від неоднорідної послідовності знаків  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ . На противагу цьому,  $xx$  і  $xy$  динамічні структурні фактори залежать від конфігурації  $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$ .

Розглянемо детальніше модель з випадково розподіленими знаками обмінних взаємодій, припускаючи, що  $\{\lambda_n\}$  є послідовністю незалежних випадкових величин, кожна з таким бімодальним розподілом ймовірностей

$$p(\lambda_n) = p\delta(\lambda_n + 1) + (1 - p)\delta(\lambda_n - 1), \quad (8)$$

де  $0 \leq p \leq 1$ . Нас цікавитимуть випадково-усереднені величини, і позначимо середнє за всіма реалізаціями випадковості як  $\overline{(\dots)} = \prod_n \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda_n p(\lambda_n) (\dots)$ . Застосувавши калібрувальне перетворення (7) та усереднивши за розподілом (8), знаходимо

$$\overline{\langle s_j^\alpha(t) s_{j+m}^\beta \rangle} = (1 - 2p)^{|m|} \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle. \quad (9)$$

Запровадивши кореляційну довжину  $\xi = -1/\ln |1 - 2p|$ , вираз (9) можна переписати у компактній формі

$$\overline{\langle s_j^\alpha(t) s_{j+m}^\beta \rangle} = \begin{cases} \exp\left(-\frac{|m|}{\xi}\right) \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle, & 0 \leq p \leq \frac{1}{2}, \\ (-1)^m \exp\left(-\frac{|m|}{\xi}\right) \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle, & \frac{1}{2} \leq p \leq 1. \end{cases} \quad (10)$$

В результаті, усереднені за випадковими конфігураціями динамічні структурні фактори зображаються у такому вигляді

$$\overline{S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)} = \sum_{m=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \exp\left(-i\kappa m - \frac{|m|}{\xi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle, \quad (11)$$

де  $0 \leq p \leq 1/2$ . Якщо  $1/2 \leq p \leq 1$ , множник  $(-1)^m$  (див рівняння (10)) потрібно взяти до уваги у рівнянні (11) і отриманий вираз  $S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)$  для  $1/2 \leq p \leq 1$  відповідає  $\overline{S_{\alpha\beta}(\kappa \mp \pi, \omega)}$  в рівнянні (11). Ми використовуємо рівняння (11), щоб обчислити  $S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)$  через відомі результати для часових кореляційних функцій  $\langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle$  однорідного ланцюжка з обмінною константою  $J$ , отриманими аналітично чи числовим методом.

Випадок спінової моделі (6) з неоднорідністю взаємодії Дзялошинського-Морія ( $J_n = J$  і  $D_n = \lambda_n D$  з  $\lambda_n = \pm 1$ ) можна проаналізувати на основі використання перетворення поворотів розглянутого у попередньому розділі. Взаємодію Дзялошинського-Морія  $D_n$  можна виключити з гамільтоніана (6) (з точністю до несуттєвого граничного доданку) за допомогою неоднорідного перетворення поворотів у спіновому просторі, яке у нашому випадку матиме такий вигляд

$$\begin{aligned} s_n^x &\rightarrow \tilde{s}_n^x = \cos \phi_n s_n^x + \sin \phi_n s_n^y, \\ s_n^y &\rightarrow \tilde{s}_n^y = -\sin \phi_n s_n^x + \cos \phi_n s_n^y, \\ s_n^z &\rightarrow \tilde{s}_n^z = s_n^z, \end{aligned} \tag{12}$$

де  $\phi_n = \sum_{m=0}^{n-1} \varphi_m$ ,  $\varphi_0$  — довільний кут, який зазвичай вважається нульовим і  $\tan \varphi_m = D_m/J$ ,  $m = 1, 2, \dots$ . В результаті, приходимо до гамільтоніана  $\tilde{H}$  без взаємодії Дзялошинського-Морія, однак, з перенормованою обмінною взаємодією  $\tilde{J}_n = \text{sgn}(J) \sqrt{J^2 + D_n^2}$ .

Тут продемонстровано, що розглянуті просторово неоднорідні моделі вирізняються можливістю усунення неоднорідності зі спінового гамільтоніана відповідним унітарним перетворенням (див. рівняння (7), (12)) і, отже, задачу можна звести до загальновідомої однорідної моделі. Точні аналітичні та точні числові дані використовуються далі для аналізу динамічних структурних факторів періодичних та випадкових спін-1/2  $XX$  ланцюжків. Розглянуті моделі демонструють досить складну поведінку, яку можна пояснити відповідними властивостями базової однорідної моделі. Таким чином, у розглянутих випадках спостережувана складність має просте походження. Слід також наголосити, що знайдено точні аналітичні результати для динамічних структурних факторів деяких періодичних/випадкових квантових спінових ланцюжків. У випадку прямих числових розрахунків для випадкових квантових спінових ланцюжків, це означало б велику кількість обчислень динамічних величин для різних реалізацій випадкових параметрів у моделі і подальше усереднення за цими реалізаціями.

У **четвертому розділі** досліджено фрустровані квантові драбинки, а саме зигзаг драбинку і ромбічний ланцюжок, для яких знайдено представлення безспінових ферміонів на основі перетворення Йордана-Вігнера. Потім, оскільки отриманий гамільтоніан описує взаємодіючі ферміони, здійснено наближення типу Гартрі-Фока та вивчено його застосовність. Зокрема, отримано, що згадана

схема опису дозволяє відтворити точний результат у випадку фази синглетних димерів, та дає задовільні результати поблизу неї. Також з'ясовано, що розв'язки теорії середнього поля для ферміонних моделей інваріантні відносно способів ферміонізації Йордана-Вігнера, які пов'язані калібрувальними перетвореннями.

Розгляньмо фрустрований спін-1/2  $XXZ$  ланцюжок  $L$  спінів ( $L \rightarrow \infty$ ):

$$H = \sum_{l=1}^L J_1 (s_l^x s_{l+1}^x + s_l^y s_{l+1}^y + \Delta s_l^z s_{l+1}^z) + J_2 (s_l^x s_{l+2}^x + s_l^y s_{l+2}^y + \Delta s_l^z s_{l+2}^z), \quad (13)$$

де  $J_1$  ( $J_2$ )  $> 0$  — антиферромагнітні взаємодії між найближчими і наступними після найближчих сусідами,  $\Delta$  — анізотропія обмінної взаємодії і  $s_l^\alpha$  — спін-1/2 оператори. Після перетворення Йордана-Вігнера спіновий гамільтоніан (13) зображається моделлю взаємодіючих безспінових ферміонів:

$$H = \sum_{l=1}^L \left( \frac{J_1}{2} c_l^+ c_{l+1} + \frac{J_2}{2} c_l^+ c_{l+2} - J_2 c_l^+ c_{l+1}^+ c_{l+1} c_{l+2} + h.c. \right) + \Delta J_1 \left( c_l^+ c_l - \frac{1}{2} \right) \left( c_{l+1}^+ c_{l+1} - \frac{1}{2} \right) + \Delta J_2 \left( c_l^+ c_l - \frac{1}{2} \right) \left( c_{l+2}^+ c_{l+2} - \frac{1}{2} \right). \quad (14)$$

Перший доданок відповідає  $XU$  взаємодії найближчих сусідів, а решта доданків, які містять взаємодію між ферміонами, є або  $XU$  взаємодією наступних сусідів, або  $zz$  частиною різних взаємодій. Інтегровність моделі руйнується внаслідок появи чотириферміонних доданків, тому ми вдаємося до наближення типу середнього поля (Гартрі-Фока), де враховано всі парні кореляції типу  $\langle c_n^+ c_m \rangle$  у факторизації таких доданків:

$$\begin{aligned} g_l &= \langle s_l^z \rangle = \langle c_l^+ c_l \rangle - \frac{1}{2}, \\ A_l &= \langle c_l^+ c_{l+1} \rangle = \langle c_{l+1}^+ c_l \rangle, \\ D_l &= \langle c_l^+ c_{l+2} \rangle = \langle c_{l+2}^+ c_l \rangle. \end{aligned} \quad (15)$$

Ці спарення пов'язані з одновузловими, сусідніми та наступними після найближчих сусідів спіновими кореляційними функціями. Далі проводимо самоузгоджене визначення цих спарень згідно статті [W. Brenig, Phys. Rev. B **56**, 2551 (1997)], де, однак, було розглянуто лише випадок  $g_l = D_l = 0$ . Таким чином, розглядаємо усі можливі фази у цьому наближенні:

- i) парамагнітна (*homogeneous*):  $A_l = A = -\frac{1}{\pi}$ ,  $g_l = D_l = 0$ ,
- ii) однорідна антиферромагнітна (*AFM+uni.*):  $g_l = (-1)^l g$ ,  $A_l = A$ , і  $D_l = D$ ,
- iii) знакозмінна антиферромагнітна (*AFM+stag.*): на противагу ii)  $D_l$  знакозмінне, тобто  $D_l = (-1)^l D$ ,
- iv) знакозмінні перескоки між найближчими вузлами (*dimer*):  $A_l = A + (-1)^l \delta$ .

Тут ми лише зазначимо, що в усіх випадках однорідний внесок у кореляцію наступних після найближчих сусідів  $D_l$  відсутній. Знакозмінна складова  $D_l$  індукується антиферромагнітним впорядкуванням і прямує до нуля при  $g \rightarrow 0$ . Таким чином, даний підхід середнього поля не годиться для розгляду границі двох слабкозв'язаних ланцюжків ( $J_1 \rightarrow 0$ ), де кореляція між наступними після найближчих сусідів стає найсильнішою.

Модель Маджумдара-Гоша<sup>7</sup>  $J_2 = J_1/2$  дозволяє перевірити узгодженість наближення середнього поля. У цій точці основний стан є подвійно виродженим і складається синглетних пар на сусідніх вузлах  $\prod_{l=1}^{N/2} [2l \mp 1, 2l]$ , де  $[2l \mp 1, 2l]$  позначає окремих синглет. Це можна пов'язати з ферміонним представленням, нагадавши, що  $S^z = +1/2(-1/2)$  на вузлі  $l$  відповідає заповненому (порожньому) вузлу  $l$ . Звідси випливає, що  $(c_{2l\mp 1}^+ - c_{2l}^+) |0\rangle$  створює синглетний зв'язок на сусідніх вузлах  $2l \mp 1, 2l$  і стани Маджумдара-Гоша можна представити як  $\prod_{l=1}^{N/2} (c_{2l\mp 1}^+ - c_{2l}^+) |0\rangle$ . Як наслідок, цей точний стан також можна отримати як розв'язок середнього поля. Для  $J_2 = J_1/2$  конфігурація iv) дає  $A = -1/4$ ,  $\delta = \pm 1/4$ . Підставляючи цей розв'язок в середньопольовий гамільтоніан, отримуємо:

$$H = \sum_{l=1}^{N/2} \frac{J_1(1 + \Delta)}{2} (\eta_l^{(t)+} \eta_l^{(t)} - \eta_l^{(s)+} \eta_l^{(s)}) + \frac{N J_1 \Delta}{8}, \quad (16)$$

де  $\eta_l^{(t)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{2l\mp 1} + c_{2l})$ ,  $\eta_l^{(s)} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{2l\mp 1} - c_{2l})$  для  $\delta = \pm 1/4$ .  $\eta_l^{(s)+}$  і  $\eta_l^{(s)}$  ( $\eta_l^{(t)+}$  і  $\eta_l^{(t)}$ ) народжують і знищують синглет (триплет) на найближчих сусідах. Це демонструє, що розв'язок середнього поля у ферміонному представленні є станом Маджумдара-Гоша  $\prod_{l=1}^{N/2} \eta_l^{(s)+} |0\rangle$  з енергією основного стану на один спін  $e = -J_1(2 + \Delta)/8$ .

Для випадку  $J_1 - J_2$   $XXZ$  ланцюжка проведено повний аналіз можливих станів такого середньопольового підходу і виявлено, що димеризований стан має найменшу енергію для  $J_2$  більших за певне критичне значення. Енергії основного стану добре узгоджуються з даними точної діагоналізації, і ми навіть відновлюємо точний результат у точці Маджумдара-Гоша. Положення критичної точки отримується з рівності енергій антиферромагнітно впорядкованого стану і димерного стану. Це дає добру згоду з числовими результатами для  $\Delta \approx 1$ , але неправильно відображає залежність від анізотропії при малих її значеннях. Ця невідповідність може бути зумовлена такими причинами: по-перше, спін-спінові кореляції повинні загасати за степеневим законом нижче  $J_{2c}$ , тоді як теорія середнього поля розглядає цю фазу як антиферромагнітно впорядковану; по-друге, у сценарії середнього поля маємо перехід першого роду, а не фазовий перехід безмежного порядку встановлений раніше. Лише при  $\Delta = 0$  ми знаходимо  $J_{2c} = J_{2,\text{dim}} = 0$  і відтворюємо фазовий перехід безмежного порядку до димеризованого стану.

<sup>7</sup>C. K. Majumdar, D. K. Ghosh, J. Math. Phys. **10**, 1388 (1969).



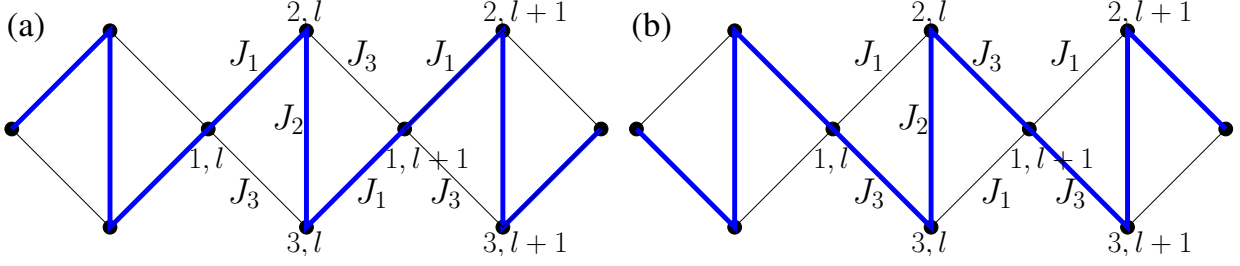


Рис. 2. Різні способи задати перетворення Йордана-Вігнера на ромбічному ланцюжку виділені товстими лініями. Випадок **i**) (панель a) і випадок **ii**) (панель b), див. основний текст.

Крім того, розраховано  $zz$  статичний структурний фактор для димеризованої фази у наближенні середнього поля. Результат збігається з точним для точки Маджумдара-Гоша, а також знайдено задовільну згоду з числовими результатами для димерної фази нижче точки Маджумдара-Гоша.

Слід зазначити, що запропонований підхід має проблеми для великих  $J_2$ . Зокрема, димерний стан у теорії середнього поля не виявляє жодної неспівмірності, про що сигналізує, наприклад, зсув максимумів статичного структурного фактора поза межею точки Маджумдара-Гоша. Примітно, що відсутність неспівмірності є особливою властивістю димерного розв'язку середнього поля, яка призводить до зникнення перескоків наступних після найближчих сусідів у ферміонній картині. Отже, для опису потрібні альтернативні підходи у області  $J_2 > J_1/2$ .

Іншим прикладом фрустрованої моделі з основним станом на основі синглетних димерів є спін-1/2  $XXZ$  модель Гайзенберга на ромбічному ланцюжку (див. рис. 2). Експериментальні реалізації відповідають здебільшого дисторсному варіанту моделі, в якому взаємодії вздовж сторін ромба є різними. Тут ми також розглядаємо квантову спін-1/2  $XX$  модель на дисторсному ромбічному ланцюжку, схематично зображену на рис. 2, з таким гамільтоніаном:

$$H_{xx} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[ (J_2 s_{2,l}^+ s_{3,l}^- + J_1 (s_{1,l}^+ s_{2,l}^- + s_{3,l}^+ s_{1,l+1}^-)) \right. \\ \left. + J_3 (s_{1,l}^+ s_{3,l}^- + s_{2,l}^+ s_{1,l+1}^-) + \text{h.c.} \right] - 2h \sum_{p=1}^3 \left( s_{p,l}^+ s_{p,l}^- - \frac{1}{2} \right), \quad (17)$$

де  $N$  — число комірок,  $s_{p,l}^\pm = s_{p,l}^x \pm i s_{p,l}^y$  — оператори піднімання і опускання спіна,  $s_{p,l}^z = s_{p,l}^+ s_{p,l}^- - \frac{1}{2}$ ,  $s_{m,l}^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) — звичайні декартові компоненти спін-1/2 операторів, перший індекс якого відповідає підгратці, а другий — комірці.  $h$  — зовнішнє магнітне поле (покладаємо  $g\mu_B = 1$ ). Надалі розрізнятимемо дві моделі: дисторсний ( $J_1 \neq J_3$ ) і симетричний ( $J_1 = J_3$ ) ромбічні ланцюжки.

Перетворення Йордана-Вігнера можна однозначно визначити на лінійному ланцюжку, де всі вузли послідовно пронумеровано. Однак ромбічний ланцюжок

складається з трьох підґраток, і існує принаймні два ідентичних способи розташування її вузлів як одновимірної послідовності, як показано на рис. 2. Випадок **i)** встановлює такий порядок вузлів  $\dots, (3, l-1), (1, l), (2, l), (3, l), (1, l+1), \dots$ , а випадок **ii)** відповідає іншому вибору порядку  $\dots, (2, l-1), (1, l), (3, l), (2, l), (1, l+1), \dots$ .

Дотримуючись стандартної процедури, можна визначити нелокальне перетворення Йордана-Вігнера, для обидвох випадків. Ми знайшли калібрувальне перетворення для ферміонної моделі, яке поєднує їх, а також генерує перетворення Йордана-Вігнера для ромбічного ланцюжка у симетричній формі. Ми застосували наближення Гартрі-Фока для ферміонного представлення моделі, який розглядає взаємодію ферміонів уздовж слабших зв'язків. Для симетричного ромбічного ланцюжка запропоновано узагальнення перетворення Йордана-Вігнера та знайдено повністю симетричне ферміонне представлення спінової моделі. Доведено, що наближення Гартрі-Фока відтворює точний результат для мономер-димерної фази в основному стані симетричного ромбічного ланцюжка ( $J_2 \geq 2J_1$ ). Крім того, ми виявили, що розв'язок наближення Гартрі-Фока для симетричного ромбічного ланцюжка є інваріантними відносно калібрувальних перетворень. Наші результати також показують добрий збіг з даними точної діагоналізації для відтворення магнітних властивостей при високих полях або малих фрустраціях. Розроблений підхід для ромбічного  $XXZ$  ланцюжка відтворює плато на кривій намагніченості на  $1/3$  намагнічення насичення та додатковий пік на кривій теплоємності. На мові ферміонів плато  $1/3$  спричинене щілиною між двома ферміонними зонами. Коли вона стає достатньо широкою, температурна залежність теплоємності набуває виразної двопікової структури. Зазначимо, що обидві ознаки є характерними для азуриту.<sup>8</sup>

Як і у попередньому випадку зигзаг ланцюжка, виявлено деякі вади підходу Гартрі-Фока. Він перестає бути справедливим для  $J_1 \sim J_2 \sim J_3$ . У цьому випадку середні поля призводять до ненульової намагніченості в нульових полях, а стрибок намагніченості зберігається і при малих температурах.

У **п'ятому розділі** запропоновано точно розв'язну модель спін- $1/2$  двонової драбинки зі взаємодіями Гайзенберґа та Ізинґа. Досліджено фазову діаграму основного стану та квантові фази, які виникають внаслідок фрустрації взаємодій та зовнішнього поля. Виявлено, що гібридна модель Ізинґа-Гайзенберґа відтворює  $1/2$  дробове плато відповідної квантової моделі Гайзенберґа.

Задамо спін- $\frac{1}{2}$  двоногу драбинку Гайзенберґа-Ізинґа через такий гамільтоні-

<sup>8</sup>H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, H. Ohta, Phys. Rev. Lett. **94**, 227201 (2005).

ан (див. також рис. 3):

$$H = \sum_{i=1}^N \left[ J_1(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_{\Delta} + J_2(s_{1,i}^z s_{1,i+1}^z + s_{2,i}^z s_{2,i+1}^z) + J_3(s_{2,i}^z s_{1,i+1}^z + s_{1,i}^z s_{2,i+1}^z) - h(s_{1,i}^z + s_{2,i}^z) \right], \quad (18)$$

де  $(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_{\Delta} = s_{1,i}^x s_{2,i}^x + s_{1,i}^y s_{2,i}^y + \Delta s_{1,i}^z s_{2,i}^z$ ,  $s_{l,i}^{\alpha}$  компоненти спіна- $\frac{1}{2}$  оператора, перший індекс позначає номер ланцюжка, другий — порядковий номер вузла,  $J_1$  —  $XXZ$  взаємодія Гайзенберга між спінами на одному щаблі,  $J_2$  — Ізингова взаємодія між сусідніми спінами одного ланцюжка,  $J_3$  — перехресна (діагональна) Ізингова взаємодія між наступними після найближчих сусідів з різних щаблів,  $h$  — зовнішнє магнітне поле. Ми також накладаємо періодичні граничні умови вздовж ланцюжків  $\mathbf{s}_{1,N+1} \equiv \mathbf{s}_{1,1}$ ,  $\mathbf{s}_{2,N+1} \equiv \mathbf{s}_{2,1}$ . Константи взаємодій  $J_2$  і  $J_3$  можна поміняти місцями шляхом перенумерації вузлів, а також їх знаки можуть бути одночасно змінені на протилежний поворотами спіну. Отже, гамільтоніани  $H(J_2, J_3)$ ,  $H(J_3, J_2)$  і  $H(-J_2, -J_3)$  в нульовому полі мають однакові власні значення, і відповідні моделі є термодинамічно еквівалентними.

Неважко переконатися, що  $z$ -проекція повного спіну на щаблі  $S_i^z = s_{1,i}^z + s_{2,i}^z$  комутує із загальним гамільтоніаном  $[S_i^z, H] = 0$  і, отже, є збережуваною величиною. Саме тому можна знайти нелінійне спінове перетворення, яке явно виділить ці величини в гамільтоніані. Таке перетворення можна задати унітарним оператором:

$$U = \prod_{i=1}^N \exp \left[ -i \frac{\pi}{2} (s_{1,i}^x + s_{2,i}^x) \right] \exp \left( i \pi s_{1,i}^x s_{2,i}^x \right) \exp \left( -i \frac{\pi}{2} s_{2,i}^y \right) \exp \left( i \pi s_{2,i}^z \right). \quad (19)$$

Остаточно, спінові оператори перетворюються таким чином:

$$\begin{aligned} U s_{1,i}^x U^+ &= s_{1,i}^x, & U s_{1,i}^y U^+ &= 2 s_{1,i}^y s_{2,i}^x, & U s_{1,i}^z U^+ &= 2 s_{1,i}^z s_{2,i}^x, \\ U s_{2,i}^x U^+ &= 2 s_{1,i}^x s_{2,i}^z, & U s_{2,i}^y U^+ &= -2 s_{1,i}^x s_{2,i}^y, & U s_{2,i}^z U^+ &= s_{2,i}^z. \end{aligned} \quad (20)$$

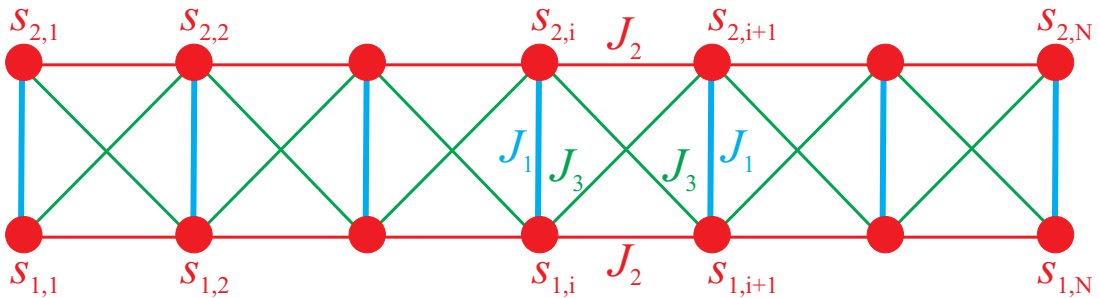


Рис. 3. Спіна- $\frac{1}{2}$  двонога драбинка Ізинга-Гайзенберга. Товсті (тонкі) лінії позначають Гайзенбергові (Ізингові) зв'язки.

Перетворений гамільтоніан має вигляд квантового ланцюжка Ізинґа з композитними спінами в ефективному поздовжньому та поперечному магнітних полях:

$$\begin{aligned} UHU^+ = & \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{J_1}{2} (1 - 2s_{1,i}^z) s_{2,i}^z + \frac{J_1\Delta}{2} s_{1,i}^z + \left[ J_2(4s_{1,i}^z s_{1,i+1}^z + 1) \right. \right. \\ & \left. \left. + 2J_3(s_{1,i+1}^z + s_{1,i}^z) \right] s_{2,i}^x s_{2,i+1}^x - h(1 + 2s_{1,i}^z) s_{2,i}^x \right\}. \end{aligned} \quad (21)$$

Тепер у гамільтоніані містяться лише  $z$ -компоненти спінів  $\mathbf{s}_{1,i}$ , які є збережуваними величинами. Замість них можна ввести оператори чисел заповнення  $n_i = s_{1,i}^z + \frac{1}{2}$ , де для чистих станів  $n_i = 0$ , а домішкових —  $n_i = 1$ .

В дисертації строго доведено, що основний стан моделі в нульовому полі відповідає однорідним конфігураціям  $n_i$ . Якщо всі зв'язки знаходяться в чистих станах ( $n_i = 0$ ), отримуємо ефективний гамільтоніан ланцюжка Ізинґа в поперечному полі

$$H^0 = \sum_{i=1}^N \left[ J_1 \left( \tilde{s}_i^z - \frac{\Delta}{4} \right) + 2(J_2 - J_3) \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x \right], \quad (22)$$

що точно розв'язується в рамках ферміонізації Йордана-Вігнера. Тут введено позначення  $\tilde{s}_i^\alpha = s_{2,i}^\alpha$ . Якщо всі зв'язки знаходяться в домішкових станах ( $n_i = 1$ ), приходимо до ланцюжка Ізинґа в поздовжньому полі,

$$H^1 = \sum_{i=1}^N \left[ 2(J_2 + J_3) \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x - 2h\tilde{s}_i^x + \frac{J_1\Delta}{4} \right], \quad (23)$$

який можна розв'язати методом матриці переносу. Мінімізуючи енергію власних станів двох конфігурацій, можна відтворити фазову діаграму основного стану, яка містить п'ять фаз: квантову парамагнітну, стрічкоподібне впорядкування вздовж ланцюжків та щаблів, стан Нееля та феромагнітний стан. У прикладеному зовнішньому полі може виникнути ще одна фаза, яка відповідає змінній конфігурації зв'язків  $n_i = 0$ ,  $n_{i+1} = 1$ , надалі будемо називати фазою шахових зв'язків (SB). Слід зазначити, що у цій фазі не існує жодних кореляцій між спінами з різних щаблів, а загальна енергія походить від спин-спінових взаємодій на синглетних щаблях і енергії Зеємана повністю поляризованих щаблів. Таким чином, зовнішнє магнітне поле може викликати появу іншої своєрідної квантової фази SB з трансляційно порушеною симетрією, тобто чергуванням синглетних і повністю поляризованих триплетних зв'язків на щаблях двонової драбинки. Звідси випливає, що фаза SB виникає при помірних значеннях зовнішнього магнітного поля і, отже, призводить до проміжного плато намагніченості на половині намагніченості насичення.

У випадку, коли діагональні взаємодії і взаємодії вздовж ланцюжків рівні ( $J_2 = J_3$ ), приходимо до границі тетраедричного ланцюжка. В цьому випадку модель можна відобразити на класичну модель Ізинґа і розв'язати точно методом матриці переносу. Показано, що вона демонструє підсилений магнетокалоричний ефект при низьких температурах близько до критичних полів.

Також, отримано точний результат для основного стану спінів-1/2 драбинки Гайзенберґа-Ізинґа у зовнішньому електричному та магнітному полях. Було продемонстровано, що спіновими впорядкуваннями в основному стані можна загалом маніпулювати внаслідок магнетоелектричного ефекту, обумовленого механізмом Кацури-Нагаоси-Балацького, через зовнішнє електричне поле, яке надає додатковий інструмент для контролю квантового фазового переходу між фазою Нееля (або стрічкоподібною фазою) та неупорядкованою квантовою парамагнітною фазою в нульовому магнітному полі. Крім того, виявляється, що взаємодія між електричним і магнітним полями може спричинити існування одного або двох фазових переходів першого роду, а також одного квантового фазового переходу другого роду. Незважаючи на те, що досліджуваний квантовий спіновий ланцюжок не демонструє спонтанної мультиферроїкової поведінки, контроль зворотного зв'язку впорядкування магнітного спіну через зовнішнє електричне поле може мати великий технологічний потенціал.

**Шостий розділ** присвячений дослідженню спінів-1/2 ортогонально-димерних моделей в одному і двох вимірах. Знайдено точний розв'язок для квантового спінів-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа з Гайзенберґовою взаємодією всередині димера та Ізинґовою між спінами на сусідніх димерах в магнітному полі, гамільтоніан якого можна записати таким чином:  $H = \sum_{i=1}^N H_i$ , де

$$\begin{aligned} H_{2i+1} &= J_1[(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z)s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z(s_{1,2i+2}^z + s_{2,2i+2}^z)] \\ &\quad + J(\mathbf{s}_{1,2i+1} \cdot \mathbf{s}_{2,2i+1})_\Delta - h(s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z), \\ H_{2i} &= J(\mathbf{s}_{1,2i} \cdot \mathbf{s}_{2,2i})_\Delta - h(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z). \end{aligned}$$

Тут  $(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_\Delta = s_{1,i}^x s_{2,i}^x + s_{1,i}^y s_{2,i}^y + \Delta s_{1,i}^z s_{2,i}^z$ ,  $s_{l,i}^\alpha$  ( $\alpha = x, y, z$ ) позначає проєкції спінів-1/2 операторів,  $J$  — анізотропна Гайзенберґова взаємодія між спінами на вертикальних і горизонтальних зв'язках,  $\Delta$  — параметр анізотропії, а  $J_1$  — Ізинґова взаємодія між спінами сусідніх димерів. Далі нас цікавитиме переважно окремий випадок антиферромагнітної взаємодії  $J > 0$ ,  $\Delta > 0$ ,  $J_1 > 0$ , що викликає фрустрацію спінів. Крім того, для зручності вибрано періодичні граничні умови для спінів  $\mathbf{s}_{l,N+1} \equiv \mathbf{s}_{l,1}$ .

Оскільки  $z$ -компонента повного спіну на вертикальному зв'язку Гайзенберґа є збереженою величиною, і це єдиний спільний оператор для сусідніх локальних гамільтоніанів  $H_i$ , усі  $H_i$  комутують один з одним. Звідси випливає, що зручно

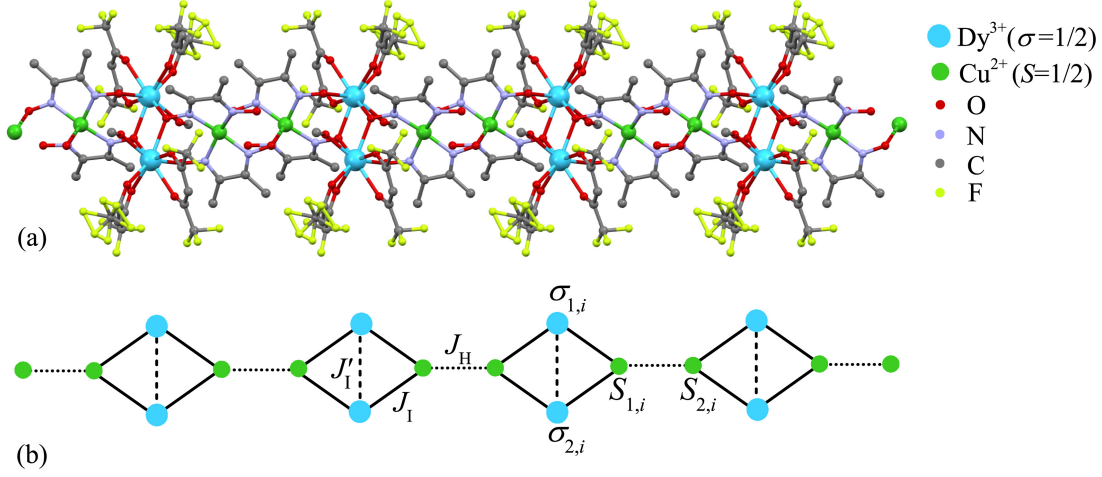


Рис. 4. (а) Кристалічна структура координаційного полімеру  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  (повну хімічну формулу див. у тексті), адаптована відповідно до кристалографічних даних.<sup>9</sup> Великі блакитні кульки визначають кристалографічне положення магнітних іонів  $\text{Dy}^{3+}$ , тоді як маленькі зелені кульки позначають кристалографічне положення магнітних іонів  $\text{Cu}^{2+}$  (кольорова схема позначення атомів представлена в легенді); (б) Магнітна структура відповідного ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа, у якій магнітні іони  $\text{Dy}^{3+}$  розглядаються як спіни Ізинґа, тоді як магнітні іони  $\text{Cu}^{2+}$  розглядаються як спіни Гайзенберґа. Константи зв'язку  $J_1$ ,  $J_1'$  і  $J_H$  приписуються міждимерній взаємодії Ізинґа між  $\text{Dy}^{3+}$  та  $\text{Cu}^{2+}$  (суцільні лінії), димерна взаємодія Ізинґа між магнітними іонами  $\text{Dy}^{3+}$  (штрихові лінії) та димерна взаємодія Гайзенберґа між  $\text{Cu}^{2+}$  магнітних іонів (пунктирні лінії) відповідно.

використати розклад повного гамільтоніана (24) на суму комутуючих частин  $H = \sum_{i=1}^{N/2} \tilde{H}_{2i+1}$ , де

$$\tilde{H}_{2i+1} = H_{2i+1} + (H_{2i} + H_{2i+2})/2. \quad (24)$$

Внаслідок цього кожен локальний гамільтоніан  $\tilde{H}_{2i+1}$  можна діагоналізувати та знайти точний розв'язок моделі за допомогою методу матриці переносу. Крива намагніченості в основному стані виявляє два дробових плато при  $1/4$  і  $1/2$  від значення насичення, а в області критичних полів, де намагніченість стрибає при  $T = 0$ , модель демонструє посилений магнетокалоричний ефект.

Цікаво, що координаційний полімер  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  забезпечує експериментальну реалізацію ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа. Насправді, полімерна сполука  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  демонструє своєрідну одновимірну архітектуру з регулярним чергуванням димерних одиниць  $\text{Dy}^{3+}$ - $\text{Dy}^{3+}$  і  $\text{Cu}^{2+}$ - $\text{Cu}^{2+}$  магнітних іонів, складених ортогонально один відносно одного, як показано на рис. 4 (а).<sup>9</sup> Її можна задати таким модифікованим гамільтоніаном (див. рис. 4 (б)):

$$\hat{\mathcal{H}} = J_H \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{S}}_{1,i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,i} + J_1' \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_{1,i}^z \hat{\sigma}_{2,i}^z + J_1 \sum_{i=1}^N [\hat{S}_{1,i}^z (\hat{\sigma}_{1,i}^z + \hat{\sigma}_{2,i}^z) + \hat{S}_{2,i}^z (\hat{\sigma}_{1,i+1}^z + \hat{\sigma}_{2,i+1}^z)]$$

<sup>9</sup>A. Okazawa, T. Nogami, H. Nojiri, T. Ishida, Chemistry of Materials **20**, 3110 (2008).

$$-g_{\text{H}}\mu_{\text{B}}B \sum_{i=1}^N (\hat{S}_{1,i}^z + \hat{S}_{2,i}^z) - g_{\text{I}}\mu_{\text{B}}B \sum_{i=1}^N (\hat{\sigma}_{1,i}^z + \hat{\sigma}_{2,i}^z), \quad (25)$$

де  $\hat{\mathbf{S}}_{1(2),i} \equiv (\hat{S}_{1(2),i}^x, \hat{S}_{1(2),i}^y, \hat{S}_{1(2),i}^z)$  позначає спін-1/2 оператори, що відносяться до магнітних іонів  $\text{Cu}^{2+}$  (Гайзенбергові спіни), і  $\hat{\sigma}_{1(2),i}^z$  стосується  $z$ -компоненти спін-1/2 операторів, що відповідають магнітним іонам  $\text{Dy}^{3+}$  (класичні Ізингові спіни). Константи взаємодій  $J_{\text{H}}$  і  $J'_{\text{I}}$  визначають силу Гайзенбергових та Ізингових димерних взаємодій в межах горизонтальних  $\text{Cu}^{2+}$ - $\text{Cu}^{2+}$  і вертикальних  $\text{Dy}^{3+}$ - $\text{Dy}^{3+}$  димерів, відповідно, в той час як константа взаємодії  $J_{\text{I}}$  визначає силу Ізингової міждиммерної взаємодії між найближчими магнітними іонами  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Dy}^{3+}$ . Доданки Зеємана  $h_{\text{H}} = g_{\text{H}}\mu_{\text{B}}B$  і  $h_{\text{I}} = g_{\text{I}}\mu_{\text{B}}B$  враховують магнетостатичну енергію магнітних моментів Гайзенбергових та Ізингових спінів за наявності зовнішнього магнітного поля  $B$ , які відрізняються через різні гіромагнітні співвідношення  $g_{\text{H}}$  і  $g_{\text{I}}$  для іонів  $\text{Cu}^{2+}$  і  $\text{Dy}^{3+}$ , відповідно. Було виявлено, що ця модель демонструє багате різноманіття класичних і квантових основних станів, які, окрім повністю насиченої парамагнітної фази, що виникає при досить високих магнітних полях, включають ще шість основних станів: фрустровану та модульовану квантову антиферромагнітну фазу, фрустровану та модульовану квантову феримагнітну фазу, а також квантову та класичну феримагнітну фази. Ці основні стани відповідають за наявність плато намагніченості на нульових і низькотемпературних кривих намагніченості, які проявляються при 0, 1/11, 5/11, 9/11 і/або 10/11 намагніченості насичення. Отримані результати застосовано до теоретичного моделювання даних намагніченості у сильних полях, виміряних раніше для полімерної координаційної сполуки  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  при досить низькій температурі  $T = 0.5$  К.<sup>9</sup> Найкраща теоретична відповідність доступних експериментальних даних на основі ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга свідчить про те, що експериментально спостережувані плато намагніченості можуть бути віднесені до класичної та квантової феримагнітних фаз, притаманні проміжним 9/11- і 10/11-плато відповідно.

Подібним чином було розглянуто модель Ізинга-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда (див. рис. 5), гамільтоніан якої теж зручно переписати як суму локальних кластерних гамільтоніанів:

$$H = \sum'_{i,j=1}^N H_{i,[j-1:j+1]} + \sum''_{i,j=1}^N H_{[i-1:i+1],j}, \quad (26)$$

$$\begin{aligned} H_{[i-1:i+1],j} &= J(\mathbf{s}_{1,i,j} \cdot \mathbf{s}_{2,i,j})\Delta + J'[(s_{1,i-1,j}^z + s_{2,i-1,j}^z)s_{1,i,j}^z \\ &\quad + s_{2,i,j}^z(s_{1,i+1,j}^z + s_{2,i+1,j}^z)] - h(s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z), \\ H_{i,[j-1:j+1]} &= J(\mathbf{s}_{1,i,j} \cdot \mathbf{s}_{2,i,j})\Delta + J'[(s_{1,i,j-1}^z + s_{2,i,j-1}^z)s_{1,i,j}^z \end{aligned} \quad (27)$$

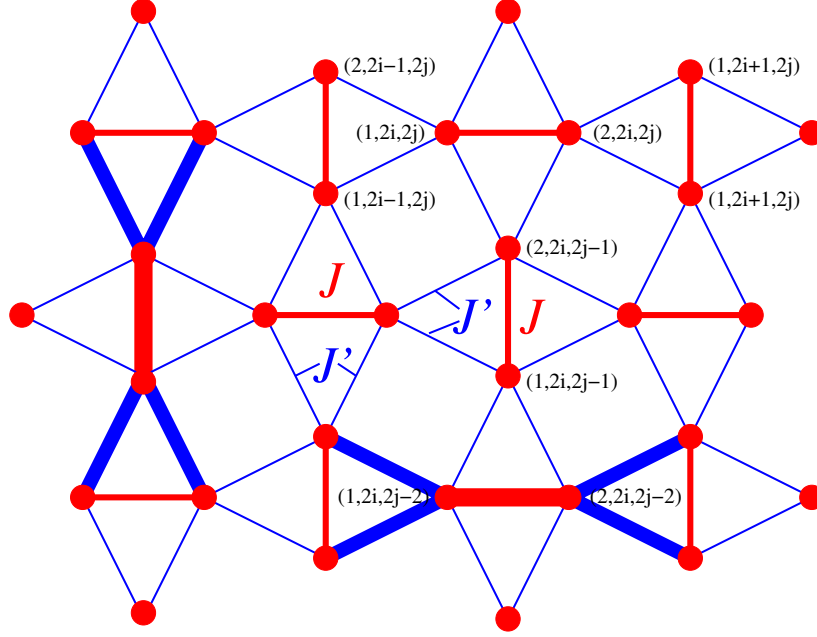


Рис. 5. Схематична ілюстрація моделі Ізинґа-Гайзенберґа зі спіном  $1/2$  на ґратці Шастри-Сазерленда з димерною  $XXZ$  взаємодією Гайзенберґа  $J(\Delta)$  і міждимерною взаємодією Ізинґа  $J'$ . Тонкі (сині) лінії показують зв'язок Ізинґа, а товсті (червоні) лінії позначають зв'язок Гайзенберґа. Спіни всередині димерів Гайзенберґа пронумеровані зліва направо та знизу вгору відповідно.

$$+s_{2,i,j}^z(s_{1,i,j+1}^z+s_{2,i,j+1}^z)]-h(s_{1,i,j}^z+s_{2,i,j}^z),$$

які включають усі доданки взаємодії між найближчими спінами зі спінових кластерів, утворених трьома послідовними димерами, розташованими в горизонтальному або вертикальному напрямку (див. спіновий кластер на рис. 5). Через специфіку форми гамільтоніана  $z$ -компонента повного спіну  $S_{i,j}^z = s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z$  кожного димера Гайзенберґа комутує із загальним гамільтоніаном (26), а також з кожним локальним кластерним гамільтоніаном (27). Звідси випливає, що  $z$ -компонента повного спіну  $S_{i,j}^z$  є збережуваною величиною, із чітко визначеними квантовими спіновими числами та, отже, усі локальні кластерні гамільтоніани (27) також комутують один з одним. Ця властивість має фундаментальне значення для зведення загального гамільтоніана (26) до діагонального представлення в термінах Ізинґових спінів, яке може бути здійснено локальними унітарними перетвореннями. В дисертації знайдено фазову діаграму основного стану, і виявлено два дробові плато на  $1/3$  і  $1/2$  намагніченості насичення в магнітному полі.  $1/3$ -плато відповідає регулярному чергуванню діагональних стрічок поляризованих димерів з двома діагональними стрічками спінових синглетоподібних димерів, тоді як шахове впорядкування синглетів і поляризованих триплетів стається у фазі з плато  $1/2$ . Цікаво, що критичні поля, при яких відбувається стрибки намагніченості у моделі Ізинґа-Гайзенберґа, є дуже близькі до критичних значень поля для моделі Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда.



Далі, в роботі запропоновано теорію збурень за квантовою  $XU$  частиною міждименрної взаємодії для ряду одновимірних та двовимірних моделей з сильними димерними взаємодіями. Продемонстровано, що така схема дає добру збіжність вже у другому порядку теорії збурень. Зокрема, таку теорію збурень для моделі Шастри-Сазерленда застосовано до теоретичного опису двовимірної магнітної сполуки  $SrCu_2(VO_3)_2$  зі складною послідовністю дробових плато. Особлива увага була зосереджена на діапазоні досить низьких магнітних полів, які намагнічують систему до проміжного плато  $1/3$  відносно значення насичення. У другому порядку теорії збурень отримано ефективну модель ґраткового газу для триплонних збуджень із жорстким відштовхуванням. Ця ефективна модель дозволяє узгоджено аналітично описувати послідовність дробових  $1/8$ -,  $1/6$ - та  $1/4$ -плато, що спостерігаються також у спорідненій магнітній сполуці  $SrCu_2(VO_3)_2$ ,<sup>10</sup> (деякі з цих плато відтворені числовими методами,<sup>11</sup> див. рис. 6). Природу основних станів, що мають відношення до цих дробових плато намагніченості, було детально з'ясовано. Вона відповідає або колонковому, або стрічковому порядку локалізованих триплонів. Крім того, стрічкове впорядкування триплонів у фазі  $1/4$  плато стабілізується слабкою взаємодією трьох частинок. Таким чином, показано, що частина  $XU$  міждименрного зв'язку відповідає за існування менших  $1/8$ -,  $1/6$ - і  $1/4$ -плато. Крім того, ми виявили, що основний стан при перехідних полях між синглет-димерною фазою і фазою плато  $1/8$ , а також між фазами плато  $1/8$  і  $1/6$  є макроскопічно виродженими. Теорія збурень вищого порядку може усунути макроскопічне виродження, і, отже, не можна виключати існування інших крихітних плато між плато  $0-1/8$ , а також плато  $1/8-1/6$ . Ми також проаналізували важливість доданків скорельованого тунелювання триплонів, єдиної квантової частини ефективного гамільтоніана, що призводить до появи квантової фази зв'язаних триплонів. Загалом ми отримали мінімальну ефективну модель, яка дає узгоджену картину для плато намагніченості в моделі Шастри-Сазерленда та прояснює їх походження.

Аналогічна теорія збурень дозволила здійснити теоретичний опис  $Cu_3(P_2O_6OH)_2$  — магнітноактивної сполуки зі структурою тримеризованого ланцюжка Гайзенберґа.

У **сьомому розділі** розглянуто ряд одно- та двовимірних моделей на декоерованих ґратках. Зокрема, досліджено квантовий октаедричний ланцюжок у випадку спінів  $1/2$  та у випадку змішаних спінів  $1$  і  $1/2$ . За допомогою різноманітних аналітичних та числових методів вивчено фазову діаграму основного стану, процес намагнічення та низькотемпературну термодинаміку спін- $1/2$  октаедричного ланцюжка Гайзенберґа. Було продемонстровано, що область сильно фрустрована-

<sup>10</sup>Y. H. Matsuda, N. Abe, S. Takeyama, H. Kageyama, P. Corboz, A. Honecker, S. R. Manmana, G. R. Foltin, K. P. Schmidt, F. Mila, Phys. Rev. Lett. **111**, 137204 (2013).

<sup>11</sup>A. Abendschein, S. Capponi, Phys. Rev. Lett. **101**, 227201 (2008).

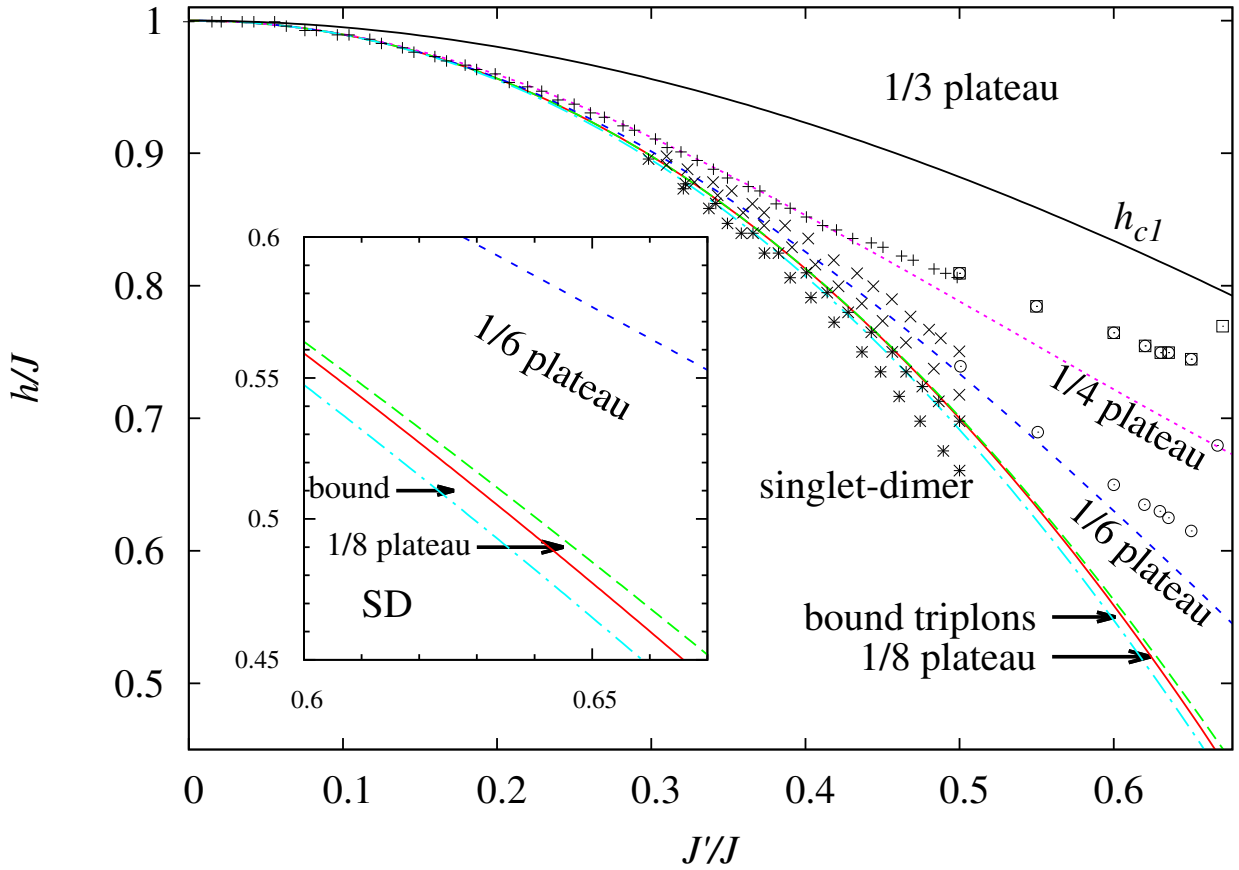


Рис. 6. Фазова діаграма основного стану спіну-1/2 моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда в площині  $J'/J - h/J$ . Критичні поля, отримані в рамках теорії збурень, яка була розроблена з точно розв'язної моделі Ізинґа-Гайзенберга до другого порядку, показані лініями різних стилів:  $h_{0-1/8}$  (червона суцільна крива),  $h_{1/8-1/6}$  (зелена штрихована крива),  $h_{1/6-1/4}$  (синя коротка штрихована крива),  $h_{1/4-1/3}$  (пурпурова пунктирна крива). Символи “+” відображають межу фаз між 1/4- і 1/3-плато, тоді як інтервал поля, обмежений символами “x”, відповідає 1/6-плато (для  $N = 36$  спінів), а інтервал поля, обмежений символами “\*”, відповідає 1/8-плато (для  $N = 32$  спінів), отриманому числовим методом CORE.<sup>11</sup> Порожні квадрати та кружечки показують результати методу iPEPS для нижніх критичних полів 1/3- та 1/4-плато відповідно.<sup>10</sup> На вставці показано збільшений масштаб фазової діаграми для інтервалу  $J'/J$ , близького до імовірних мікроскопічних параметрів для  $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ .

них параметрів фазової діаграми основного стану може бути точно знайдена в межах варіаційного принципу та підходу локалізованих маґнонів, які доводять існування мономер-тетрамерної фази і фази локалізованих маґнонів при низьких і сильних маґнітних полях, відповідно. З іншого боку, частина фазової діаграми основного стану, що залишилася, була досліджена за допомогою числових даних методу DMRG для ефективних ланцюжків Гайзенберга зі змішаним спіном. Було виявлено, що в цьому просторі параметрів модель демонструє різноманітні основні стани, які включають три різні квантові феримаґнітні фази, дві фази квантової спінової рідини, а також нестандартну синґлетну тетрамер-гексамерну фазу. Таке розмаїття призводить до появи у кривих намагніченості додаткових проміжних плато на 1/5, 2/5, 3/5 намагніченості насичення.

Розроблено модифіковану теорію локалізованих магнонів, яка враховує одномагнонні та двомагнонні стани з найнижчою енергією. Це є важливими для відтворення багатемагнонних станів, відповідальних за правильний опис низькотемпературної термодинаміки спін-1/2 ромбічного і октаедричного ланцюжків Гайзенберґа. Достовірність і точність розробленого підходу локалізованих магнонів в області параметрів сильної фрустрації було підтверджено шляхом прямого порівняння з числовими даними повної діагоналізації скінченних систем.

Детальне дослідження змішаного спін-(1,1/2) октаедричного ланцюжка Гайзенберґа виявляє ще більше екзотичних квантових станів із характером однорідної фази Голдейна, кластерних фаз Голдейна, феримагнітних фаз типу Ліба-Матіса, квантових спінових рідин і зв'язані фази магнонних кристалів. Три кластерні фази Голдейна відповідають більшому періоду магнітної елементарної комірки внаслідок спонтанного порушення трансляційної симетрії. Вони складаються з скінченного спінового кластера в триплетному стані (кілька з'єднаних октаедрів), який можна ефективно описати відкритими спін-1 ланцюжками Гайзенберґа з непарного числа спінів, відокремлених один від одного станом синглетних плакеток. У той час як дві фрагментовані кластерні фази Голдейна з періодом  $p = 3$  і чотири стійкі лише у відносно вузькій області параметрів, гексамер-тетрамерна фаза як інший особливий випадок з періодом  $p = 2$  стійка у відносно широкому інтервалі магнітних полів. Варто зауважити, що аналогічна кластерна фаза Голдейна була нещодавно передбачена також для кристалу федотовіту.

Одновимірні декоровані моделі згадані вище демонструють складну структуру основного стану, яка не є стійкою щодо температурних флуктуацій. Натомість двовимірні моделі демонструють також ряд нетипових температурних фазових переходів.

Далі розглянемо спін-1/2 антиферромагнетик Гайзенберґа в магнітному полі на квадратній ґратці, декорованій ромбами. Ґратка схематично показана на рис. 7, а гамільтоніан моделі визначається як

$$\begin{aligned}
 H = & J_1 \sum_{i=1}^N \left[ \mathbf{S}_{i,1} \cdot \left( \mathbf{S}_{i,2} + \mathbf{S}_{i,3} + \mathbf{S}_{i,4} + \mathbf{S}_{i,5} + \mathbf{S}_{i-\hat{x},2} + \mathbf{S}_{i-\hat{x},3} + \mathbf{S}_{i-\hat{y},4} + \mathbf{S}_{i-\hat{y},5} \right) \right] \\
 & + J_2 \sum_{i=1}^N \left( \mathbf{S}_{i,2} \cdot \mathbf{S}_{i,3} + \mathbf{S}_{i,4} \cdot \mathbf{S}_{i,5} \right) - h \sum_{i=1}^N \sum_{\mu=1}^5 S_{i,\mu}^z, \quad (28)
 \end{aligned}$$

де  $\mathbf{S}_{i,\mu} = (S_{i,\mu}^x, S_{i,\mu}^y, S_{i,\mu}^z)$  представляють спін-1/2 оператори, які відповідають  $\mu$ -му спіну в  $i$ -вій елементарній комірниці. Позначимо відповідний вузол ґратки  $(i, \mu)$ . Крім того, індекс  $i - \hat{x}$  ( $i - \hat{y}$ ) відноситься до елементарної комірки ліворуч (під)  $i$ -тою елементарною коміркою. Тут розглядається скінченна ґратка з  $N$  елементарними комітками та  $N_s = 5N$  вузлами з періодичними граничними умовами. Як правило, ми використовуємо квадра-

тні ґратки з  $N = L^2$ . Крім того,  $J_1$  і  $J_2$  — дві обмінні взаємодії, зображені на рис. 7 чорними та червоними лініями відповідно. Останній член у  $H$  відповідає енергії взаємодії спінів  $1/2$  із зовнішнім магнітним полем  $h$ .

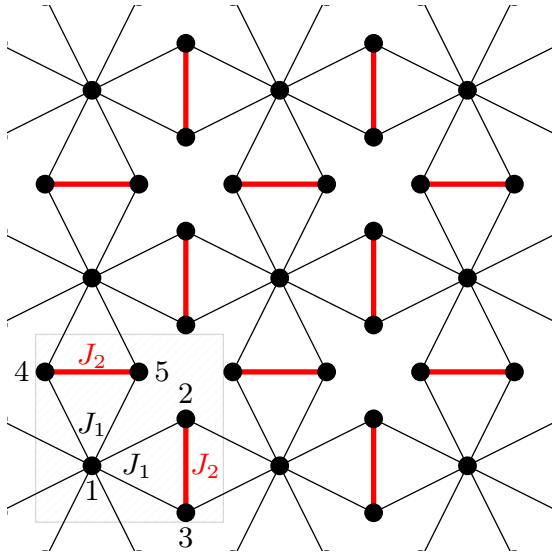


Рис. 7. Ілюстрація квадратної ґратки, декорованої ромбами, з позначеною елементарною коміркою (пунктирний квадрат), а також п'яти різних вузлів (кругів) усередині елементарної комірки та двох різних обмінних взаємодій  $J_1$  (тонкі чорні лінії) та  $J_2$  (товсті червоні лінії).

Використовуючи комбінацію аналітичних підходів, точної діагоналізації, DMRG, встановлено властивості основного стану (див. рис. 8), серед яких (i) раніше визначені фази Ліба-Матіса (LM), димер-тетрамерна (DT) і мономер-димерна (MD) фази поширюються на скінченні магнітні поля з плато намагніченості  $3/5$ ,  $0$  і  $1/5$ , (ii) у проміжних полях фаза DT зникає, а за межами цього діапазону магнітного поля, прямий квантовий фазовий перехід першого роду відбувається між фазами LM і MD, (iii) при сильних магнітних полях, на додаток до повністю насиченої парамагнітної фази (PM), з'являється фаза зі скошеним спіном. Термодинамічні властивості моделі досліджено за допомогою квантового методу Монте Карло (вільного від проблеми знаку), а також за допомогою ефективних гамільтоніанів, які базуються на теорії локалізованих магнонів. Спираючись на відповідні результати в інших квантових спінових моделях, показано, що лінії квантових фазових переходів LM-MD простягаються до скінченної температури, закінчуючись лінією критичних точок, які належать до класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа. Крім того, виявлено, що нахил лінії переходу змінює знак при збільшенні сили магнітного поля.

Строгі результати для ліній квантових фазових переходів і лінії критичних точок отримано на основі спін- $1/2$  моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами. Узагальнене декораційно-ітераційне перетворення забезпечило нам точне відображення вихідної моделі на ефективну спін- $1/2$  модель Ізинґа на квадратній ґратці, із залежними від температури ефективними взаємодіями найближчих сусідів і магнітним полем. Фазові діаграми основного стану моделі Ізинґа-Гайзенберґа і відповідної моделі Гайзенберґа (28) (див. рис. 8) виявляють принципову схожість. Зокрема, обидві моделі мають розширену лінію квантових фазових переходів першого роду, яка відділяє феримагнітний (FRI) режим від режиму MD. Проте, у випадку Гайзенберґа феримагнітна фаза все ще демонструє квантові флуктуації, на відміну від суто класичної природи основно-

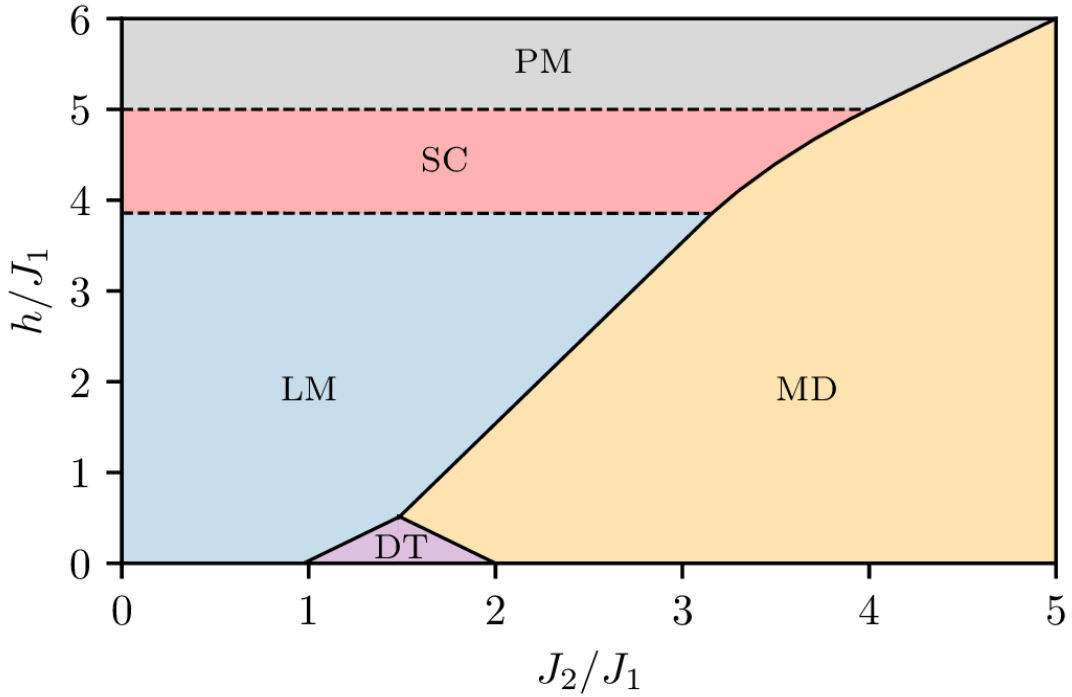


Рис. 8. Фазова діаграма основного стану спин-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованій ромбами у площині  $J_2/J_1 - h/J_1$ , що містить фази Ліба-Матіса (LM) і скісних спінів (SC), а також димер-тетрамерну (DT), мономер-димерну (MD), насичену парамагнітну (PM) фази. Штриховими (суцільними) лініями позначені квантові фазові переходи другого (першого) роду.

го стану FRI, який можна ідентифікувати як фазу з усіма спінами Гайзенберга повністю поляризованими в напрямку магнітного поля та всіма спінами Ізинґа, спрямованими протилежно до нього. Ґрунтуючись на цьому відображенні, вихідна модель на квадратній ґратці, декорованій ромбами, стає точно розв'язною в межах певного підпростору області параметрів, де ефективне поле дорівнює нулю. Окрім тривіального випадку, можна отримати зникаюче ефективне поле вздовж межі основного стану між фазами FRI та MD, що призводить до точно визначених ліній теплових фазових переходів першого роду, кожна з яких закінчується в критичній точці. Точне відображення доводить, що ця критична точка належить до класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа. Ми продемонстрували, що лінії фазових переходів першого роду згинаються або в бік нижчих, або в бік вищих магнітних полів при підвищенні температури, залежно від співвідношення взаємодій. Цей вигин ліній фазового переходу було пояснено з точки зору низькоенергетичних збуджень відносно основних станів FRI та MD.

Декораційно-ітераційне перетворення, застосоване вище до спінової моделі на ромбічно-декорованій ґратці, використовується також у випадку складнішої спин-електронної моделі. Розглянуто гібридну модель взаємодіючої спин-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці, яка має локалізований спин Ізинґа на кожному нодальному вузлі ґратки і два делокалізова-

них мобільних електронів на кожній парі декорованих вузлів. Повний гамільтоніан моделі можна записати як суму за гамільтоніанами декорованих зв'язків  $\hat{\mathcal{H}} = \sum_k \hat{\mathcal{H}}_k$ , де кожен гамільтоніан зв'язку  $\hat{\mathcal{H}}_k$  включає всі взаємодіючі доданки  $k$ -ої пари делокалізованих електронів

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_k = & -t \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \left( c_{k1,\alpha}^\dagger c_{k2,\alpha} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i=1}^2 n_{ki,\uparrow} n_{ki,\downarrow} \\ & - \frac{J}{2} \sum_{i=1}^2 \hat{\sigma}_{ki}^z \left( c_{ki,\uparrow}^\dagger c_{ki,\uparrow} - c_{ki,\downarrow}^\dagger c_{ki,\downarrow} \right). \end{aligned} \quad (29)$$

Тут  $c_{ki,\alpha}^\dagger$  і  $c_{ki,\alpha}$  ( $\alpha = \uparrow, \downarrow$ ) — звичайні ферміонні оператори народження та знищення, відповідно,  $n_{i,\alpha} = c_{ki,\alpha}^\dagger c_{ki,\alpha}$  і  $\hat{\sigma}_{ki}^z$  — стандартний спін-1/2 оператор. Параметр тунелювання  $t$  враховує кінетичну енергію рухомих електронів,  $J$  описує Ізінгіву взаємодію між мобільними електронами та їхніми найближчими Ізінгівими спінами, а  $U \geq 0$  позначає Кулонове відштовхування на вузлі.

За допомогою узагальненого декораційно-ітераційного перетворення було досліджено вплив локального Кулонового відштовхування та тунелювання делокалізованих електронів на властивості основного стану та критичну поведінку взаємодіючої спін-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці. Отримані точні результати показують, що залежність критичної температури від сили локального Кулонового відштовхування в основному залежить від того, чи є кінетичний доданок  $t$  більшим або меншим за граничне значення  $t \approx 0.25J$ .

## ОСНОВНІ РЕЗУЛЬТАТИ ТА ВИСНОВКИ

1. Взаємодія Дзялошинського-Морія призводить до нетривіальних змін у динамічних величинах квантових спін-1/2 ХУ ланцюжків: двоферміонні динамічні величини, які формують профілі динамічних структурних факторів, є відмінними від нуля лише в обмеженій області площини хвильовий вектор-частота, вони можуть мати сингулярності ван Гова не лише з показником 1/2, а також з 2/3.
2. Отримано точні результати для аналізу динамічних структурних факторів періодичних та випадкових квантових спін-1/2 ХУ ланцюжків, де неоднорідність задається знаком обмінної взаємодії. Виявлено, що випадковість обмінної взаємодії змінює поведінку  $xy$  кореляційних функцій зі степеневій на експоненційно загасаючу.
3. Метод ферміонізації Йордана-Вігнера у поєднанні з наближенням Гартрі-Фока дає задовільний опис одновимірних фрустрованих спінових моделей близько до границі фази синглетних димерів. Розв'язки цієї теорії для

ферміонних моделей є інваріантні відносно способів задання перетворення Йордана-Вігнера, які пов'язані калібрувальними перетвореннями.

4. Знайдено точний розв'язок для спінів-1/2 фрустрованої двонової драбинки Ізинґа-Гайзенберґа та досліджено фази основного стану. Встановлено, що гібридна модель Ізинґа-Гайзенберґа відтворює 1/2 дробове плато відповідної квантової моделі Гайзенберґа. Дану модель узагальнено на випадок магнетоелектрика на спінів-1/2 драбинці Ізинґа-Гайзенберґа, для якої строго досліджено магнетоелектричний ефект близько критичного поля.
5. Знайдено точний розв'язок для спінів-1/2 одновимірної ортогонально-димерної моделі Ізинґа-Гайзенберґа та її двовимірного аналогу на ґратці Шастри-Сазерленда. Отримано фазові діаграми моделей та продемонстровано, що магнітне поле призводить до виникнення дробових плато у цих моделях. На основі точного розв'язку для ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа здійснено теоретичний опис координаційного полімеру  $[Dy_2Cu_2]_n$ .
6. Запропоновано теорію збурень за квантовою ХУ частиною міждимерної взаємодії для ряду одновимірних та двовимірних моделей з сильними димерними взаємодіями. Продемонстровано, що така схема дає добру збіжність вже у другому порядку теорії збурень. Цей метод застосовано до теоретичного опису двовимірної магнітної сполуки  $SrCu_2(VO_3)_2$  зі складною послідовністю дробових плато, а також до квазіодновимірної сполуки  $Cu_3(P_2O_6OH)_2$ , яка відповідає тримеризованому ланцюжку слабкозв'язаних спінових димерів.
7. Досліджено квантовий спінів-1/2 октаедричний ланцюжок, а також його аналог зі змішаними спінами 1 і 1/2. Знайдено фазові діаграми моделей та встановлено квантові фази зі складною структурою. Змішаний спінів-1 і спінів-1/2 октаедричний ланцюжок Гайзенберґа виявляє розмаїття квантових станів: однорідна фаза Голдейна, кластерні фази Голдейна, феримагнітні фази Ліба-Матіса, квантові спінові рідини, яке призводить до появи серії дробових плато намагніченості у магнітному полі.
8. Для моделі Гайзенберґа на ромбічно-декорованій квадратній ґратці ідентифіковано лінії квантових фазових переходів першого роду між феримагнітною фазою Ліба-Матіса і мономер-димерною фазою, які закінчуються лінією критичних точок при скінченних температурах. Встановлено, що модель Ізинґа-Гайзенберґа на ромбічно-декорованій квадратній ґратці дозволяє знайти точний розв'язок для згаданих ліній фазових переходів першого роду та строго дослідити лінію критичних точок.
9. Спін-електронна модель на подвійно-декорованій квадратній ґратці з Ізинґовими спінами на основних вузлах і делокалізованими електронами на парі декорованих вузлів демонструє немонотонну залежність температури

переходу антиферромагнітного впорядкування від інтегралу переносу та Кулонового відштовхування електронів.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ ПРАЦЬ

1. Derzhko O., Verkholyak T. Effects of Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the dynamics of  $s = 1/2$   $XX$  chain // *Czechoslovak Journal of Physics*. — 2004. — Vol. 54, no. SUPPL. 4. — P. D531–D534.
2. Derzhko O., Verkholyak T. Dynamics of the spin-1/2  $XY$  chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // *Physica B: Condensed Matter*. — 2005. — Vol. 359-361. — P. 1403–1405.
3. The effects of the symmetric and antisymmetric anisotropies on the dynamics of the spin-1/2  $XY$  chain / O. Derzhko, T. Verkholyak, T. Krokhmalskii, H. Büttner // *Physica B: Condensed Matter*. — 2006. — Vol. 378-380. — P. 443–444.
4. Dynamic probes of quantum spin chains with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction / Oleg Derzhko, Taras Verkholyak, Taras Krokhmalskii, Helmut Büttner // *Phys. Rev. B*. — 2006. — Vol. 73. — P. 214407.
5. Derzhko O., Verkholyak T. Dynamic Structure Factors of the Spin-1/2  $XX$  Chain with Dzyaloshinskii-Moriya Interaction // *Journal of the Physical Society of Japan*. — 2006. — Vol. 75, no. 10. — P. 104711.
6. Verkholyak T., Honecker A., Brenig W. Jordan-Wigner approach to the frustrated spin one-half  $XXZ$  chain // *European Physical Journal B*. — 2006. — Vol. 49, no. 3. — P. 283–287.
7. Dynamic properties of quantum spin chains: Simple route to complex behavior / Taras Verkholyak, Oleg Derzhko, Taras Krokhmalskii, Joachim Stolze // *Phys. Rev. B*. — 2007. — Vol. 76. — P. 144418.
8. Dynamic correlations in a random spin-1/2  $XY$  chain / T. Verkholyak, O. Derzhko, T. Krokhmalskii, J. Stolze // *Acta Physica Polonica A*. — 2008. — Vol. 113, no. 1. — P. 441–444.
9. Spontaneous antiferromagnetic long-range order in the two-dimensional hybrid model of localized Ising spins and itinerant electrons / Jozef Strečka, Akinori Tanaka, Lucia Čanová, Taras Verkholyak // *Phys. Rev. B*. — 2009. — Vol. 80. — P. 174410.
10. Spin-1/2  $XXZ$  diamond chain within the Jordan-Wigner fermionization approach / T. Verkholyak, J. Strečka, M. Jaščur, J. Richter // *Acta Physica Polonica A*. — 2010. — Vol. 118, no. 5. — P. 978–979.
11. Effect of on-site Coulomb repulsion on phase transitions in exactly solved spin-electron model / L. Gálisová, J. Strečka, A. Tanaka, T. Verkholyak // *Acta Physica Polonica A*. — 2010. — Vol. 118, no. 5. — P. 942–943.



12. Magnetic properties of the quantum spin-1/2  $XX$  diamond chain: The Jordan-Wigner approach / T. Verkholyak, J. Strečka, M. Jaščur, J. Richter // *European Physical Journal B*. — 2011. — Vol. 80, no. 4. — P. 433–444.
13. Effect of the on-site interaction on the magnetic properties of an exactly solvable spin-electron system / L Gálisová, J Strečka, A Tanaka, T Verkholyak // *Journal of Physics: Condensed Matter*. — 2011. — Vol. 23, no. 17. — P. 175602.
14. Verkholyak T., Strečka J. Quantum phase transitions in the exactly solved spin-1/2 Heisenberg–Ising ladder // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. — 2012. — Vol. 45, no. 30. — P. 305001.
15. Verkholyak T., Strečka J. Ground state of a spin-1/2 Heisenberg-Ising two-leg ladder with  $XYZ$  intra-rung coupling // *Condensed Matter Physics*. — 2013. — Vol. 16, no. 1. — P. 13601.
16. Verkholyak T., Strečka J. Exact solution for a quantum spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain with Heisenberg intradimer and Ising interdimer interactions // *Phys. Rev. B*. — 2013. — Vol. 88. — P. 134419.
17. Magnetization process, bipartite entanglement, and enhanced magnetocaloric effect of the exactly solved spin-1/2 Ising-Heisenberg tetrahedral chain / Jozef Strečka, Onofre Rojas, Taras Verkholyak, Marcelo L. Lyra // *Phys. Rev. E*. — 2014. — Vol. 89. — P. 022143.
18. Verkholyak T., Strečka J. Low-temperature thermodynamics of spin-1/2 orthogonal-dimer chain with Ising and Heisenberg interactions // *Acta Physica Polonica A*. — 2014. — Vol. 126, no. 1. — P. 22–23.
19. Exact ground states of a spin- $\frac{1}{2}$  Ising-Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice in a magnetic field / Taras Verkholyak, Jozef Strečka, Frédéric Mila, Kai P. Schmidt // *Phys. Rev. B*. — 2014. — Vol. 90. — P. 134413.
20. Verkholyak T., Strečka J. Fractional magnetization plateaus of the spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg orthogonal-dimer chain: Strong-coupling approach developed from the exactly solved Ising-Heisenberg model // *Phys. Rev. B*. — 2016. — Vol. 94. — P. 144410.
21. Diversity of quantum ground states and quantum phase transitions of a spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg octahedral chain / Jozef Strečka, Johannes Richter, Oleg Derzhko, Taras Verkholyak, Katarína Karl'ová // *Phys. Rev. B*. — 2017. — Vol. 95. — P. 224415.
22. Magnetization process and low-temperature thermodynamics of a spin-1/2 Heisenberg octahedral chain / Jozef Strečka, Johannes Richter, Oleg Derzhko, Taras Verkholyak, Katarína Karl'ová // *Physica B: Condensed Matter*. — 2018. — Vol. 536. — P. 364–368.
23. Karl'ová K., Strečka J., Verkholyak T. Cluster-based Haldane phases, bound magnon crystals and quantum spin liquids of a mixed spin-1 and spin-1/2 Heisenberg octahedral chain // *Phys. Rev. B*. — 2019. — Vol. 100. — P. 094405.

24. Strečka J., Gálisová L., Verkholyak T. Insights into nature of a magnetization plateau of 3d-4f coordination polymer  $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$  from a spin-1/2 Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain // *Condensed Matter Physics*. — 2020. — Vol. 23, no. 4. — P. 43708.
25. Strečka J., Gálisová L., Verkholyak T. Enhanced magnetoelectric effect near a field-driven zero-temperature quantum phase transition of the spin-1/2 Heisenberg-Ising ladder // *Phys. Rev. E*. — 2020. — Vol. 101. — P. 012103.
26. Magnetization plateaus and bipartite entanglement of an exactly solved spin-1/2 Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain / Lucia Gálisová, Jozef Strečka, Taras Verkholyak, Samuel Havadej // *Physica E: Low-dimensional Systems and Nanostructures*. — 2021. — Vol. 125. — P. 114089.
27. Verkholyak T., Strečka J. Modified strong-coupling treatment of a spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg trimerized chain developed from the exactly solved Ising-Heisenberg diamond chain // *Phys. Rev. B*. — 2021. — Vol. 103. — P. 184415.
28. Verkholyak T., Strečka J. Fractional magnetization plateaux of a spin-1/2 Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice: effect of quantum  $XY$  interdimer coupling // *SciPost Phys*. — 2022. — Vol. 12. — P. 056.
29. Frustrated magnetism of spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg diamond and octahedral chains as a statistical mechanical monomer-dimer problem / Jozef Strečka, Taras Verkholyak, Johannes Richter, Katarína Karl'ová, Oleg Derzhko, Jürgen Schnack // *Phys. Rev. B*. — 2022. — Vol. 105. — P. 064420.
30. Phases of the spin- $\frac{1}{2}$  Heisenberg antiferromagnet on the diamond-decorated square lattice in a magnetic field / Nils Caci, Katarína Karl'ová, Taras Verkholyak, Jozef Strečka, Stefan Wessel, Andreas Honecker // *Phys. Rev. B*. — 2023. — Vol. 107. — P. 115143.
31. Thermal first-order phase transitions, Ising critical points, and reentrance in the Ising-Heisenberg model on the diamond-decorated square lattice in a magnetic field / Jozef Strečka, Katarína Karl'ová, Taras Verkholyak, Nils Caci, Stefan Wessel, Andreas Honecker // *Phys. Rev. B*. — 2023. — Vol. 107. — P. 134402.
32. Derzhko O., Verkholyak T. Effects of Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the dynamics of  $s = 1/2$   $XX$  chain // 12th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG04, Košice (Slovakia), July 10–15, 2004. Programme and Abstracts. — Košice, 2004. — P. 72.
33. The effects of the symmetric and antisymmetric anisotropies on the dynamics of the spin-1/2  $XY$  chain / O. Derzhko, T. Verkholyak, T. Krokhnalskii, H. Büttner // The International conference on Strongly Correlated Electron Systems SCES05 (July 26-30, 2005, Vienna, Austria). Programme and Abstracts. — Vienna, 2005. — P. 125.
34. Verkholyak T., Honecker A., Brenig W. The study of the  $J_1 - J_2$   $s = 1/2$   $XXZ$  chain using the Jordan-Wigner and mean-field approaches // *Statistical*

- Physics 2005: Modern problems and New Applications (August 28-30, 2005, Lviv, Ukraine). Book of abstracts. — Lviv, 2005. — P. 191.
35. Dynamic correlations in a random spin-1/2  $XY$  chain / T. Verkholyak, O. Derzhko, T. Krokhamalskii, J. Stolze // 13th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG07 (July 9-12, 2007, Košice, Slovakia). Programme and abstracts. — Košice, 2007. — P. 223.
  36. Verkholyak T., Strečka J., Jaščur M. Quantum spin-1/2  $XX$  model on a distorted diamond chain and Jordan-Wigner fermionization // 3-rd Conference Statistical Physics: Modern Trends and Applications. Programme and Abstracts (June 23-25, 2009, Lviv, Ukraine). — Lviv, 2009. — P. 240.
  37. Verkholyak T., Strečka J., Jaščur M. Spin-1/2  $XY$  diamond chain: Magnetic properties using the Jordan-Wigner fermionization // International Conference on Magnetism ICM 2009. Program and Abstracts (July 26-31, 2009, Karlsruhe, Germany). — Karlsruhe, 2009. — P. 284.
  38. Effect of On-Site Coulomb Repulsion on Phase Transitions in Exactly Solved Spin-Electron Model / L Čanová, J. Strečka, A. Tanaka, T. Verkholyak // 14th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG10 (July 6-9, 2010, Košice, Slovakia). Programme and abstracts. — Košice, 2010. — P. 186.
  39. Spin-1/2  $XXZ$  Diamond Chain within the Jordan-Wigner Fermionization Approach / T. Verkholyak, J. Strečka, M. Jaščur, J. Richter // 14th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG10 (July 6-9, 2010, Košice, Slovakia). Programme and abstracts. — Košice, 2010. — P. 206.
  40. Verkholyak T., Strečka J. First- and second-order quantum phase transitions in the exactly solved spin-1/2 Heisenberg-Ising ladder // The 37-th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics MECO 37, (18-22 March 2012, Tatranské Matliare, Slovakia) Programme and Abstracts. — Tatranské Matliare, 2012. — P. 38.
  41. Verkholyak T., Strečka J. Ground state of the spin-1/2  $XYZ$ -Heisenberg-Ising two-leg ladder // 4-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications. Book of abstracts (July 3-6, 2012, Lviv, Ukraine). — Lviv, 2012. — P. 212.
  42. Verkholyak T., Strečka J. Thermodynamics of spin-1/2 orthogonal-dimer chain with Ising and anisotropic Heisenberg interactions // 15th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG13 (Košice, Slovakia, June 17-21, 2013) Programme and abstracts. — Košice, 2013. — P. 50.
  43. Magnetization process of the spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg tetrahedral chain: a comparison / J. Strečka, O. Rojas, T. Verkholyak, M. L. Lyra // The 39-th Conference of the Middle European Cooperation in Statistical Physics MECO 39, Coventry (England), April 8-10, 2014. — Coventry, 2014. — P. 93.
  44. Verkholyak T., Strečka J. Strong coupling approach to the spin-1/2 orthogonal-

- dimer chain // 16th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG16, Košice (Slovakia), June 13–17, 2016. Programme and Abstracts. — Košice, 2016. — P. 76.
45. Verkholyak T., Strečka J. Effect of quantum  $XY$  interdimer coupling on the low-field magnetization of the Shastry-Sutherland model // Workshop on Current Problems in Physics, Lviv, 03–04 July 2018. — Lviv, 2018. — P. 10. — [J. Phys. Stud. — 2015. — Vol. 19, no. 1/2. — P. 3998–3].
  46. Verkholyak T., Strečka J. Modified strong-coupling approach to the trimerized Heisenberg chain // 17th Czech and Slovak Conference on Magnetism CSMAG19 (Košice, Slovakia, June 3-7, 2019) Programme and abstracts. — Košice, 2019. — P. 92.
  47. Verkholyak T., Strečka J. The Ising-Heisenberg model on the distorted Shastry-Sutherland lattice: ground-state properties // Workshop on Quantum Magnetism: Theoretical Challenges and Future Perspectives, Košice (Slovakia), June 13–17, 2019. — Košice, 2019. — P. 16.
  48. Verkholyak T., Strečka J. Effect of the bond distortion in the Ising-Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice // 5-th Conference on Statistical Physics: Modern Trends and Applications, Lviv (Ukraine), June 3–6, 2019. — Lviv, 2019. — P. 167.
  49. Verkholyak T., Strečka J. Modified strong-coupling treatment of a spin-1/2 Heisenberg trimerized chain // III Workshop on Quantum Low-Dimensional Magnetism (Belo Horizonte–MG, Brasil, June 1–4, 2021). Scientific Program. — Belo Horizonte, 2021. — P. 8.
  50. Verkholyak T., Strečka J. The Shastry-Sutherland model in low and high fields: perturbative treatment of  $XY$  interdimer coupling // 1st Workshop on Perspective Electron Spin Systems for Future Quantum Technologies, Košice (Slovakia), June 28–29, 2022. — Košice, 2019. — P. 16.
  51. Phase boundary of spin-1/2 Ising-Heisenberg and Heisenberg models on a diamond decorated square lattice as magnetic analog of vapor-liquid phase border of water / Jozef Strečka, Taras Verkholyak, Katarína Karl'ová, Nils Caci, Stefan Wessel, Andreas Honecker // 1st Workshop on Perspective Electron Spin Systems for Future Quantum Technologies, Košice (Slovakia), June 28–29, 2022. — Košice, 2019. — P. 40.
  52. Verkholyak T., Strečka J. Exotic quantum phases in the Shastry-Sutherland model: perturbative approach // IV Workshop on Quantum Low-Dimensional Magnetism, Maceio-AL (Brasil), June 6–10, 2022. — Maceio-AL, 2019. — P. 16.

## АНОТАЦІЯ

**Верхоляк Т.М. Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз.** — На пра- вах рукопису.

*Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних на- ук за спеціальністю 01.04.02 — теоретична фізика, Інститут фізики конденсо- ваних систем Національної академії наук України, Львів, 2024.*

Дисертаційна робота стосується вивчення ефектів квантових флуктуацій і фрустрацій на низькотемпературні властивості низьковимірних квантових спі- нових моделей. Ряд точних результатів отримано для динамічних властивостей однорідних та випадкових спін-1/2  $XY$  ланцюжків у поперечному полі з взає- модією Дзялошинського-Морія, використовуючи ферміонізацію Йордана-Вігнера. Складніші моделі фрустрованих драбинок досліджено в наближенні Гартрі-Фока для ферміонізованих гамільтоніанів. Знайдено точний розв'язок для ряду гібри- дних моделей Ізинґа-Гайзенберґа з сильними димерними взаємодіями. Використо- вуючи точні результати для цих моделей, запропоновано підхід сильного зв'язку, заснований на теорії збурень для  $XY$  частини міждимерної взаємодії. Одно- та двовимірні моделі на декорованих ґратках досліджено різними аналітичними та числовими методами. Показано, що двовимірна модель Гайзенберґа, декорована ромбами, виявляє лінію квантових фазових переходів першого роду. Ця лінія пе- реходів простягається до скінченних температур, закінчуючись лінією критичних точок, які належать до класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа.

**Ключові слова:** низьковимірні магнетики, динамічні властивості, фру- страції, плато дробової намагніченості, точні розв'язки.

## ABSTRACT

**Verkholyak T.M. Quantum fluctuations and frustrations in low- dimensional spin models: exact results and perturbative analysis.** — Manuscript.

*Thesis submitted for the degree of Doctor of Sciences in physics and mathematics on specialization 01.04.02 — theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2024.*

The present thesis concerns the study of the effects of quantum fluctuations and frustrations on the low-temperature properties of low-dimensional quantum spin models. The uniform and random spin-1/2 anisotropic  $XY$  chain in a transverse field with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction is considered to examine the effect of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the  $zz$ ,  $xx$  and  $yy$  dynamic structure factors. It

is found that  $zz$  dynamic structure factor is much more sensitive to the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the case of the anisotropic  $XY$  chain, and may exhibit additional van Hove singularities not only with exponent  $1/2$  but also with  $2/3$ .

Frustrated models, the  $J_1 - J_2$   $XXZ$  chain and  $XXZ$  model on the diamond chain, are studied within the Hartree-Fock approximation for fermionized Hamiltonians. Such an approach shows good agreement close to the singlet-dimer phase. Several hybrid Ising-Heisenberg models with strong dimer interactions are solved exactly taking into account the conservation of the  $z$ -component of total spin on strong Heisenberg bonds. The nature of the fractional plateaux in these frustrated models is discussed. The spin- $1/2$  Ising-Heisenberg orthogonal-dimer chain with two different gyromagnetic factors of the Ising and Heisenberg spins is used to provide the theoretical description of coordination polymer  $[\text{Cu}_2\text{Dy}_2]_n$ . Using the exact results for the Ising-Heisenberg models with the strong intra-dimer couplings, we suggested the strong-coupling approach based on the perturbative treatment of  $XY$  part of the inter-dimer interaction. The approximate results obtained within the second-order perturbation theory are in excellent agreement with available numerical data.

One- and two-dimensional models on decorated lattices were investigated by various analytical and numerical methods. In particular, the spin- $1/2$  Heisenberg antiferromagnet on the frustrated diamond-decorated square lattice in a magnetic field shows both the complex ground-state phases and non-trivial thermodynamic properties. At intermediate field strength, a first-order quantum phase transition line between the ferrimagnetic and the monomer-dimer regime is identified. This first-order line extends to finite temperatures, terminating in a line of critical points that belong to the universality class of the two-dimensional Ising model. These phase transitions are studied rigorously in the case of a simplified spin- $1/2$  Ising-Heisenberg model on a diamond-decorated square lattice by means of a decoration-iteration transformation.

**Keywords:** low-dimensional magnets, dynamic properties, frustrations, fractional magnetization plateaux, exact solutions.