

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ
ІНСТИТУТ ФІЗИКИ КОНДЕНСОВАНИХ СИСТЕМ

На правах рукопису

КРУПНИЦЬКА Олеся Михайлівна



УДК 537.9, 537.622

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

01.04.02 – теоретична фізика

А В Т О Р Е Ф Е Р А Т
дисертації на здобуття наукового ступеня
кандидата фізико-математичних наук

Львів – 2017

Дисертацією є рукопис.

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

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

Офіційні опоненти: доктор фізико-математичних наук, професор **Лукіянець Богдан Антонович**, Національний університет “Львівська політехніка” (м. Львів), професор кафедри прикладної фізики і наноматеріалознавства;

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

Захист відбудеться 31 травня 2017 року о 15 год. 30 хв. на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 35.156.01 при Інституті фізики конденсованих систем Національної академії наук України за адресою:
79011 м. Львів, вул. Свенціцького, 1.

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

Автореферат дисертації розісланий 26 квітня 2017 року.

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



А.М. Швайка

Актуальність теми. В останні роки багато уваги приділяється вивченню властивостей фрустрованих квантових спінових антиферромагнетиків [G. Misguich and C. Lhuillier, in *Frustrated Spin Systems*, edited by H. T. Diep (World Scientific, Singapore, 2005), pp. 229–306; J. Richter, J. Schulenburg, and A. Honecker, in *Quantum Magnetism*, Lecture Notes in Physics Vol. 645, edited by U. Schollwöck, J. Richter, D. J. J. Farnell, and R. F. Bishop (Springer, Berlin, 2004), pp. 85–153]. Великий інтерес до таких систем зумовлений тим, що на відміну від феромагнетиків, в антиферромагнітних спінових системах можливі фрустрації, спричинені конкуренцією взаємодій. Це може бути конкуренція обмінних взаємодій між сусідніми спінами і наступними після сусідніх спінами на простих ґратках (наприклад, $J_1 - J_2$ модель на квадратній ґратці). Інший приклад – взаємодія найближчих спінів на ґратках зі складнішою геометрією (наприклад, на ґратці кагоме). Фрустрації і квантові флуктуації можуть приводити до цілковитого зникнення далекого магнітного порядку і появи різних станів (фаз) з екзотичними властивостями. Крім того, взаємодія з магнітним полем також відіграє роль однієї з конкуруючих взаємодій, що додатково збагачує фазову діаграму.

Серед фрустрованих квантових антиферромагнетиків існує спеціальний клас моделей, які в певному режимі (сильні магнітні поля) допускають існування спеціальних низькоенергетичних станів, які називають локалізованими магнонами. Теоретично локалізовані магнони були відкриті в 2002 році в роботі [J. Schulenburg, et al. Phys. Rev. Lett., 2002, **88**, 167207], звідки й почалось їх інтенсивне дослідження [див. огляди: J. Richter, et al. J. Phys.: Condens. Matter, 2004, **16**, S779; J. Richter, Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv), 2005, **31**, 918; O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, and H.-J. Schmidt, Fizika Nizkikh Temperatur (Kharkiv), 2007, **33**, 982]. Теорія, розвинена в 2002-2010 роках і підсумована в наведених оглядах, стосується так званої ідеальної плоскостонної геометрії, коли одномагнонні стани строго локалізовані (одномагнонна зона строго бездисперсійна). Однак, в реальних системах можливе відхилення від умов, які забезпечують строгу локалізацію магнонів. Прикладами таких систем є природний мінерал азурит $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ [H. Kikuchi, et al. Phys. Rev. Lett., 2005, **94**, 227201; Prog. Theor. Phys. Suppl., 2005 **159**, 1], ліказит $\text{Cu}_3(\text{OH})_5(\text{NO}_3)\cdot 2\text{H}_2\text{O}$ [H. Kikuchi et al. Physics Procedia, 2015, **75**, 653] чи магнітна сполука $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ [H. Tanaka, et al. J. Phys. Soc. Jpn., 2014, **83**, 103701]. Магнітні властивості всіх цих сполук описуються фрустрованими квантовими спіновими системами з майже бездисперсійною найнижчою одномагнонною зоною. Постає важливе питання: як впливає відхилення від ідеальної геометрії на спостережувані властивості? Іншими словами, як виглядатиме теорія таких фрустрованих квантових антиферромагнетиків поблизу парадигми локалізованих магнонів? Питання застосовності теорії локалізованих магнонів до пояснення результатів експериментальних досліджень визначає актуальність теми даної дисертаційної роботи.

Зв'язок роботи з науковими програмами, планами і темами. Дисертаційна робота виконувалась в Інституті фізики конденсованих систем НАН України згі-

дно з планами робіт за темою “Квантові багаточастинкові граткові системи: динамічний відгук і ефекти сильних кореляцій” (2013–2017 рр., номер держреєстрації 0112U007761) та в межах програмно-цільової теми “Багатомасштабність і структурна складність конденсованої речовини: теорія і застосування” (2012–2016 рр., номер держреєстрації 0112U003119).

Метою даної дисертації є розроблення систематичної теорії для низькотемпературних властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга з майже бездисперсійною магнетонною зоною в режимі сильних магнітних полів та низьких температур. У роботі було поставлено такі задачі:

- розроблення ефективної теорії спінів- $\frac{1}{2}$ фрустрованої антиферромагнітної моделі Гайзенберга на кількох гратках з майже бездисперсійною магнетонною зоною (фрустровані ромбічний та димер-плакетний спінові ланцюжки та двовимірна гратка квадратне кагоме);
- вивчення низькотемпературних властивостей спінів- $\frac{1}{2}$ XXZ антиферромагнітної моделі Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку в довільно орієнтованому магнітному полі; побудова ефективного опису низькотемпературних властивостей вихідної моделі у полях поблизу поля насичення;
- отримання низькоенергетичних ефективних гамільтоніанів для фрустрованого класично-квантового спінів- $\frac{1}{2}$ ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга;
- дослідження ефектів міжланцюжкових взаємодій у системі фрустрованих квантових антиферромагнітних ромбічних ланцюжків.

Об’єктом дослідження є спінів- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітна модель Гайзенберга на кількох фрустрованих гратках (ромбічний та димер-плакетний спінові ланцюжки, гратка квадратне кагоме) з майже бездисперсійними магнетонними станами.

Предметом дослідження дисертаційної роботи є характерні особливості низькотемпературної термодинаміки фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга в сильних магнітних полях.

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

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

взаємодій Гайзенберга для азуриту: $\Delta \approx 0.85$. Запропоновано реалізацію фазового переходу Березінського-Костерліца-Таулеса у двовимірному фрустрованому антиферромагнетикі при низьких температурах і сильних магнітних полях. Врахування неідеальної геометрії, анізотропії обмінних взаємодій, а також міжланцюжкових взаємодій дає змогу пов'язати теорію з експериментом.

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

Особистий внесок здобувача. Постановку завдань дослідження здійснив науковий керівник роботи доктор фізико-математичних наук О. В. Держко. Серед публікацій [1–7] одна стаття виконана дисертанткою одноосібно [5]. В спільних публікаціях [1–4, 6, 7] авторці дисертації належить:

- отримання одномагнетонного спектру та виразу для вільної енергії для ідеального та деформованого ромбічних ланцюжків в режимі сильних полів та низьких температур [1];
- аналітичне виведення виразів для ефективних моделей з допомогою операторної теорії збурень в наближенні сильного зв'язку та в підході локалізованих магнетонів [2,3];
- числовий аналіз ефективних моделей [2,3];
- виведення ефективних гамільтоніанів для спінів- $\frac{1}{2}$ XXZ ромбічного ланцюжка Гайзенберга в довільно орієнтованому магнітному полі [4];
- отримання фазової діаграми, яка ілюструє появу фази спінової рідини, для ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга [6];
- побудова ефективного опису системи ромбічних спінових ланцюжків зі слабкою міжланцюжковою взаємодією [7].

Обговорення та інтерпретацію отриманих результатів в статтях [1–4,6,7] співавтори виконували разом.

Апробація роботи. Результати дисертації представлялись на таких конференціях: Міжнародна 4-та наукова конференція “Статистична фізика: сучасні напрямки та застосування” (Львів, 2012 р.); Національна конференція “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики” (Тернопіль, 2012 р.); XII, XIII, XIV, XV та XVI Всеукраїнські школи-семінари і конкурси молодих вчених зі статистичної фізики і теорії конденсованої речовини (Львів, 2012, 2013, 2014, 2015 та 2016

pp.); Міжнародна 5-та конференція молодих вчених “Проблеми теоретичної фізики” (Київ, 2013 р.); TRENDOXIDES2015, New TRENDS in Correlated OXIDES and Interfaces (Brescia, 2015); Conference: What about U ? - Effects of Hubbard Interactions and Hund's Coupling in Solids (Trieste, 2016), а також на семінарах в Інституті фізики конденсованих систем НАН України.

Результати, викладені в дисертації, **опубліковано** в шести статтях [1–6], одному препринті [7], а також в тезах восьми конференцій [8–15].

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

ЗМІСТ РОБОТИ

У **вступі** обгрунтовано актуальність дослідження, сформульовано мету роботи, визначено наукову новизну і практичну цінність отриманих результатів та наведено стисло характеристику дисертації.

У **першому розділі** проведено огляд літератури, що стосується даної роботи. В першій частині цього розділу пояснено концепцію локалізованих магніонів в теорії фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга. Показано, що певний клас фрустрованих квантових антиферомагнетиків в режимі сильних магнітних полів та низьких температур допускає існування станів локалізованих магніонів з найменшою енергією і це дає можливість детально дослідити властивості таких систем. Концепція локалізованих магніонів застосовна лише у випадку так званої ідеальної плоскостовної геометрії ґратки, коли одномагніонна зона з найменшою енергією строго бездисперсійна (плоска). В другій частині першого розділу обговорено існуючі твердотільні реалізації фрустрованих квантових антиферомагнетиків Гайзенберга, у яких існують локалізовані магніони, а також сформульовано задачі, які буде розв'язано в даній дисертаційній роботі.

Другий розділ дисертації стосується теоретичного дослідження низькотемпературних магнітних характеристик деформованого фрустрованого ромбічного антиферомагнітного ланцюжка Гайзенберга. Розглянуто спін- $\frac{1}{2}$ антиферомагнітну модель Гайзенберга на деформованому фрустрованому ромбічному спіновому ланцюжку. Для опису властивостей цієї системи в режимі сильних магнітних полів і низьких температур використано картину локалізованих магніонів. Ці дослідження мотивовані результатами експериментів для природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, магнітні властивості якого описуються спін- $\frac{1}{2}$ антиферомагнітною моделлю Гайзенберга на деформованому ромбічному ланцюжку з константами обмінної взаємодії J_1 , J_2 , J_3 та J_m , див. рис. 1.

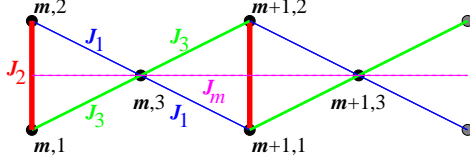


Рис. 1: Деформований фрустрований ромбічний спіновий ланцюжок. Ідеальний ромбічний ланцюжок реалізується за умови $J_1 = J_3$, $J_m = 0$, $J_2 > 2J_1$.

Набір обмінних взаємодій для азуриту, знайдений з першопринципних розрахунків методом функціонала густини, є таким: $J_1 = 15.51$ К, $J_2 = 33$ К, $J_3 = 6.93$ К, $J_m = 4.62$ К. Хоча ці константи і не відповідають умовам ідеальної геометрії, вони не аж так далеко від набору, що відповідав би таким умовам; про це свідчать результати експериментальних досліджень кривої намагніченості азуриту, яка нагадує передбачення картини локалізованих магніонів.

Вклад незалежних локалізованих магніонів у статистичну суму у випадку ідеальної геометрії, коли одномагнінна зона з енергією ε_1 строго бездисперсійна, знаходиться з рівності:

$$\begin{aligned} Z(T, h, N) &= \sum_{n=0}^{n_{\max}} g_N(n) \exp\left(-\frac{E_n(h)}{T}\right) = \\ &= \exp\left(-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}\right) \sum_{n=0}^N C_N^n \exp\left(\frac{\mu}{T}n\right) = e^{-\frac{E_{\text{FM}} - \frac{h}{2}N}{T}} \left(1 + e^{\frac{h_{\text{sat}} - h}{T}}\right)^N, \end{aligned} \quad (1)$$

де $E_n(h)$ — енергія багатомангонного стану за наявності зовнішнього магнітного поля h , $\mu = \varepsilon_1 - h$, а $h_{\text{sat}} = \varepsilon_1$ магнітне поле насичення. Основне (евристичне) припущення для деформованого випадку таке: вважається, що статистична сума для дещо деформованого фрустрованого ромбічного антиферомагнітного ланцюжка Гайзенберга все ще має форму, виписану в цьому рівнянні, але одномагнінні енергії тепер визначаються справжньою (деформованою) геометрією ґратки. Зберігши структуру статистичної суми, ми прийняли правило жорстких мономерів, хоча тепер маємо справу з мономерами з енергіями, що трохи відрізняються. Отже у випадку слабкого відхилення від ідеальної плоскостонної геометрії маємо

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

де $\varepsilon_1(\kappa)$ визначається відповідним кубічним рівнянням (елементарна комірка містить три вузли). В загальному випадку вираз для $\varepsilon_1(\kappa)$ такий:

$$\varepsilon_1(\kappa) = -2 \sqrt{-\frac{p}{3}} \cos \frac{\alpha - \pi}{3} - \frac{a}{3}, \quad p = -\frac{a^2}{3} + b, \quad q = \frac{2a^3}{27} - \frac{ab}{3} + c, \quad \cos \alpha = -q \left(2 \sqrt{-\frac{p}{27}}\right)^{-1},$$

де a , b і c відомі функції J_1 , J_2 , J_3 та J_m .

Знаючи статистичну суму (2), маємо вільну енергію, а отже і всі термодинамічні функції спінової системи — намагніченість, ентропію чи теплоємність. Варто зауважити, що в граничному випадку малих J_1/J_2 , J_3/J_2 і J_m/J_2 одномагнінний спектр

$\varepsilon_1(k)$ після підстановки у запропонований вираз для статистичної суми (2) дає вільну енергію точно розв'язного спін- $\frac{1}{2}$ XX ланцюжка у поперечному полі. Запропонований анзац (2) працює добре, коли магنونів мало (тобто, поблизу поля насичення). Якщо ж число магنونів зростає (тобто, поблизу найбільшого поля для плато $\frac{1}{3}$) просте правило жорстких мономерів недостатнє для опису тепер вже не цілком локалізованих магنونів, бо між ними може бути набагато складніша взаємодія.

На рис. 2 показано, як виглядає у такому підході крива намагніченості азурику (великі квадрати), яка має майже стрибок при полях дещо більших за 30 Т і температурі біля 0.1 К. Ця риса кривої намагніченості є проявом локалізованих магنونів, котрі домінують у властивостях при сильних полях і низьких температурах.

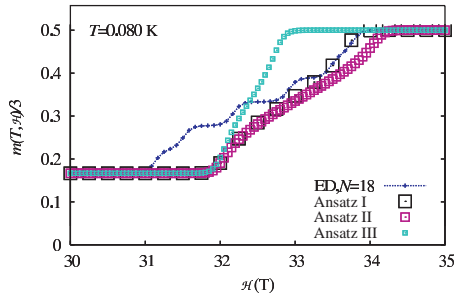


Рис. 2: Крива намагніченості $m(T, h)$ деформованого фрустрованого ромбічного ланцюжка в залежності від зовнішнього магнітного поля H для $T = 0.08$ К; параметри обмінної взаємодії для азурику: $J_1 = 15.51$ К, $J_2 = 33$ К, $J_3 = 6.93$ К, $J_m = 4.62$ К, а гіромагнітне відношення $g = 2.06$.

Приклад, для димер-плакетного ланцюжка або для двовимірної ґратки квадратне кагоме. Однак, залишається незрозуміло, яким чином він може бути систематично поліпшеним.

У **третьому розділі** систематично досліджено ефекти малих відхилень від умов, що забезпечують строгу локалізацію магنونів. Для цього розглянуто спін- $\frac{1}{2}$ антиферомагнітну модель Гайзенберга на трьох ґратках (див. рис. 3) з гамільтоніаном:

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j - h S^z, \quad S^z = \sum_{i=1}^N s_i^z, \quad J_{ij} > 0. \quad (3)$$

Використовуючи операторну теорію збурень, побудовано низькоенергетичні ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку (в припущенні, що J_1/J_2 ,

Дані точної діагоналізації приведено для ромбічного спінового ланцюжка, який складається з 18 вузлів. При температурі $T = 0.08$ К отримані теоретичні результати узгоджуються з експериментальними даними і результатами точної діагоналізації. Теорія, яка використовує точний розв'язок кубічного рівняння (великі квадрати) збігається з результатами точної діагоналізації при полях понад 33.5 Т, але передбачає плато $1/3$ вже нижче 32 Т, хоча результат точної діагоналізації — біля 31 Т. Якщо ж використовувати для $\varepsilon_1(k)$ наближені розв'язки кубічного рівняння, то результати точної діагоналізації можна відтворити лише якісно (малі і дуже малі квадрати).

Такий опис може бути застосовано до інших подібних спінових систем, наприклад, для димер-плакетного ланцюжка або для двовимірної ґратки квадратне кагоме.

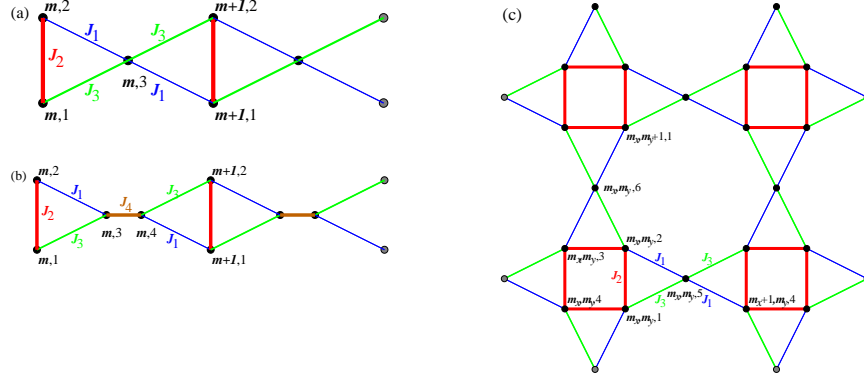


Рис. 3: Ромбічний (а) і димер-плакетний (б) спінові ланцюжки та гратка квадратне кагоме (с). Вказано значення обмінних взаємодій J_{ij} у гамільтоніані (3).

J_3/J_2 є малі) та в підході локалізованих магнонів (у припущенні, що $|J_1 - J_3|/J_2$ є малим) для ромбічного і димер-пакетного спінових ланцюжків та для гратки квадратне кагоме. Зупинимось для прикладу на деформованому фрустрованому ромбічному спіновому ланцюжку. Ми маємо справу з випадком, коли обмінна взаємодія Гайзенберга J_2 є найбільшою. В сильних магнітних полях беруться до уваги тільки два з чотирьох станів на кожному вертикальному зв'язку, а саме, повністю поляризований стан $|u\rangle = |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle$ і одномагнітний стан $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)$. Тут 1 і 2 нумерують вузли на вертикальному зв'язку. Оскільки J_2 є найбільшою взаємодією, гамільтоніан H розбиваємо на “основну частину” H_{main} (гамільтоніан, який описує всі комірки і взаємодію Зеемана всіх спінів з магнітним полем) і на “збурення” $V = H - H_{\text{main}}$. Розділяємо гільбертовий простір, у якому діє H на простір, який складається з основних станів $|\varphi_0\rangle$ гамільтоніана H_{main} і на решту простору. Також вводимо оператор проектування $P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$ на цей простір: $P = \otimes_m P_m$, $P_m = \mathcal{P}_m \otimes (|\uparrow_3\rangle\langle\uparrow_3|)_m$, $\mathcal{P}_m = (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_m$. Нам потрібен ефективний гамільтоніан, який діє тільки у модельному просторі, але дає точну енергію основного стану. Його можна знайти, застосувавши операторну теорію збурень:

$$H_{\text{eff}} = PHP + PV \sum_{\alpha \neq 0} \frac{|\varphi_\alpha\rangle\langle\varphi_\alpha|}{\varepsilon_0 - \varepsilon_\alpha} VP + \dots, \quad (4)$$

де $|\varphi_\alpha\rangle$, $\alpha \neq 0$ є збуджені стани гамільтоніана H_{main} . Крім того зручно ввести (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ оператори

$$T^z = \frac{1}{2} (|u\rangle\langle u| - |d\rangle\langle d|), \quad T^+ = |u\rangle\langle d|, \quad T^- = |d\rangle\langle u| \quad (5)$$

для кожної комірки m . В результаті отримаємо спін- $\frac{1}{2}$ ізотропну XY модель в магнітному полі з гамільтоніаном

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N}C - \hbar \sum_m T_m^z + J \sum_{(mn)} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y), \quad (6)$$

де параметри ефективного гамільтоніана є такі: $\hbar = h - h_1 - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4J_2}$, $J = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4J_2}$, а $h_1 = J_2 + J$, $J = \frac{J_3 + J_1}{2}$. Ефективний гамільтоніан в наближенні сильного зв'язку для димер-плакетного спінового ланцюжка і ґратки кагоме має такий самий вигляд, як і в рівнянні (6), однак з іншими параметрами C , \hbar та J .

Наближення сильного зв'язку можна удосконалити. Для цього при побудові ефективного гамільтоніана будемо виходити не з гамільтоніана H , а з гамільтоніана

$$\mathcal{H} = \mathcal{P}H\mathcal{P}, \quad \mathcal{P} = \otimes_{m=1}^{\mathcal{N}} \mathcal{P}_m, \quad \mathcal{P}_m = (|u\rangle\langle u| + |d\rangle\langle d|)_m, \quad (7)$$

де \mathcal{P} – оператор проектування на стани $|u\rangle$ і $|d\rangle$ комірок $m = 1, \dots, \mathcal{N}$. Перейшовши від H до \mathcal{H} , ми зробили наближення, зменшивши кількість станів, які беруться до уваги (замість чотирьох станів на кожному вертикальному зв'язку розглядаємо тільки два з них – повністю поляризований стан $|u\rangle$ і стан локалізованого магнона $|d\rangle$). Далі, розділяємо \mathcal{H} на основну частину $\mathcal{H}_{\text{main}}$ (тобто гамільтоніан \mathcal{H} з $J_1 = J_3 = J$ і $h = h_1$) і збурення $\mathcal{V} = \mathcal{H} - \mathcal{H}_{\text{main}}$. Основний стан $\mathcal{H}_{\text{main}}$ такий самий, як і у наближенні сильного зв'язку $|\varphi_0\rangle$ (хоча й з іншим значенням енергії основного стану ε_0), а отже і проектор на простір, у якому діє $\mathcal{H}_{\text{main}}$ такий самий: $P = |\varphi_0\rangle\langle\varphi_0|$. В результаті для ефективного гамільтоніана (4) отримуємо:

$$\mathcal{H}_{\text{eff}} = \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} \left[J (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y) + J^z T_m^z T_{m+1}^z - \hbar T_m^z + C \right], \quad (8)$$

де константи є такі:

$$\begin{aligned} J &= \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} \frac{1}{1 - \frac{J}{J_2}}, \quad J^z = \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2} \left(\frac{1}{1 - \frac{J}{J_2}} - 1 \right), \\ \hbar &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2}{4J_2}, \quad J = \frac{J_1 + J_3}{2}, \quad h_1 = J_2 + J. \end{aligned} \quad (9)$$

Отриманий ефективний гамільтоніан (8), (9) є гамільтоніаном спін- $\frac{1}{2}$ XXZ ланцюжка Гайзенберга. Це одна з стандартних моделей статистичної механіки, яка може бути досліджена такими методами як підстановка Бете, точна діагоналізація, квантове Монте Карло або метод ренормалізаційної групи для матриці густини. Якщо в рівнянні (9) провести розклад в ряд відносно J/J_2 , то приходимо до результату, який відтворює не тільки другий порядок теорії збурень у наближенні сильного зв'язку

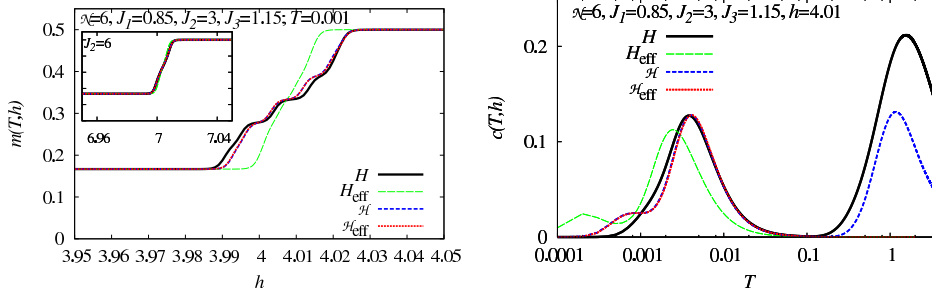


Рис. 4: Порівняння вихідної та ефективних моделей для деформованого ромбічного ланцюжка з $N = 18$ вузлів ($N = 6$ комірок): криві намагніченості в залежності від магнітного поля та температурні залежності теплоємності для $J_1 = 0.85$, $J_2 = 3$ і $J_2 = 6$ (вставка), $J_3 = 1.15$.

(див. вище), а й третій порядок цієї теорії збурень [A. Honecker and A. Läuchli, Phys. Rev. B, 2001, **63**, 174407].

Для того, щоб з'ясувати як працюють ефективні гамільтоніани, зроблено точну діагоналізацію для трьох моделей з гамільтоніанами H , H_{eff} та \mathcal{H}_{eff} і проведено порівняння отриманих результатів для початкової моделі H та ефективних моделей (H_{eff} і \mathcal{H}_{eff}). При цьому розглянуто криві намагніченості при низьких температурах та температурну залежність теплоємності в сильних магнітних полях. На рис. 4 приведено низькотемпературні криві намагніченості та температурні залежності питомої теплоємності для деформованого ромбічного ланцюжка. Порівнюючи результати для вихідної моделі H з результатами для ефективних моделей, які описуються гамільтоніанами H_{eff} та \mathcal{H}_{eff} , бачимо їх добре узгодження. Зауважимо, що на рис. 4 відхилення від ідеальної геометрії $|J_1 - J_3|/J$ сягає аж 0.4, але навіть при таких великих відхиленнях узгодженість залишається задовільною.

В ефективній моделі для двовимірної ґратки квадратне кагоме може відбуватися фазовий перехід Березінського-Костерліца-Таулеса [V. L. Berezinskii, Zh. Eksp. Teor. Fiz., 1970, **59**, 907; J. M. Kosterlitz and D. J. Thouless, J. Phys. C, 1973, **6**, 1181]. Температура переходу Березінського-Костерліца-Таулеса (БКТ-переходу) для класичної ізотропної XY моделі на квадратній ґратці (без поля) є $T_c \approx 0.893|J|$. БКТ-перехід відбувається і у квантовому випадку, коли $s = \frac{1}{2}$, однак при нижчій температурі $T_c \approx 0.343|J|$ [H.-Q. Ding, Phys. Rev. Lett., 1992, **68**, 1927]. Максимум питомої теплоємності у температурній залежності використовується як індикатор БКТ-переходу: відомо, що БКТ-перехід стається при дещо нижчій температурі аніж та, при якій теплоємність має максимум. На рис. 5 зліва приведені питомі теплоємності при високих магнітних полях та низьких температурах для моделі Гайзенберга на деформованій ґратці квадратне кагоме, а на рис. 5 справа приведена фазова діаграма анти-

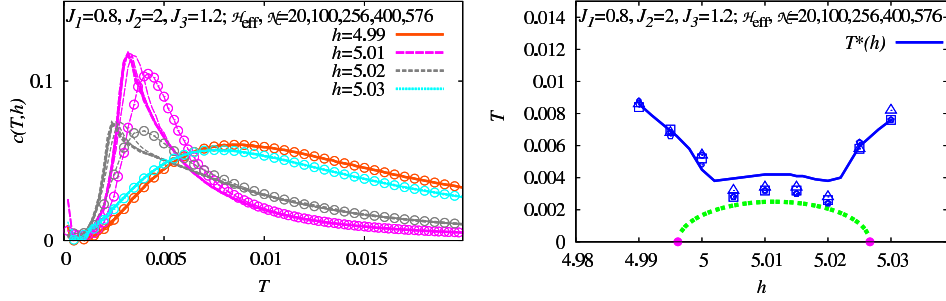


Рис. 5: Ліва панель: питома теплоємність $c(T, h)$ при високих магнітних полях ($h = 4.99, 5.01, 5.02, 5.03$) та низьких температурах для моделі Гайзенберга на деформованій ґратці квадратне кагоме з параметрами $J_1 = 0.8, J_2 = 2, J_3 = 1.2$. Права панель: фазова діаграма для цієї системи в сильних магнітних полях (товста пунктирна крива), визначена положеннями максимумів T^* питомої теплоємності $c(T, h)$, яким відповідає товста суцільна крива ($N = 20$) і символи (трикутники – $N = 100$, квадрати – $N = 256$, п'ятикутники – $N = 400$, кружечки – $N = 576$).

ферромагнітної моделі Гайзенберга на деформованій ґратці квадратне кагоме. Товста суцільна лінія позначає положення T^* максимуму питомої теплоємності $c(T, h)$, отриманої методом точної діагоналізації для $N = 20$. Символи позначають дані квантового Монте Карло ($N = 100, 256, 400, 576$) для $T^*(h)$. Таким чином, квантовий спіновий антиферромагнетик Гайзенберга на ґратці квадратне кагоме з параметрами поблизу значень, що відповідають бездисперсійній одномагнітній зоні, має виявляти фізику БКТ-переходу. Цей перехід стається у квантовому антиферромагнетичу квадратне кагоме з майже ідеальною плоскостовною геометрією при низьких температурах і полях поблизу поля насичення.

Розгляд у розділі 3 стосувався випадку ізотропної взаємодії Гайзенберга, що не завжди має місце у реальних сполуках. Наприклад, в азуриті чи магнітній сполуці $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ крива намагніченості залежить від напрямку прикладеного зовнішнього магнітного поля, що зумовлено анізотропією обмінних взаємодій Гайзенберга. Тому в **четвертому розділі** досліджено спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітну XXZ модель на деформованому ромбічному спіновому ланцюжку в довільно орієнтованому зовнішньому магнітному полі. Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} (s_i^x s_j^x + s_i^y s_j^y + \Delta s_i^z s_j^z) - h \sum_{i=1}^N s_i^\alpha, \quad \alpha = x, z \quad (10)$$

[див. рис. 3 (а)], а $J_{ij} > 0$ та $\Delta \neq 1$. $J_2 > 0$ і, як і раніше, є найбільшою антиферромагнітною обмінною взаємодією; у сильному магнітному полі лише два стани на вертикальному зв'язку J_2 відіграватимуть роль у низькотемпературних властиво-

стях. Це дає можливість ефективно описати вихідну фрустровану квантову спінову систему з допомогою простішої двостанової моделі. Практично збудувати такі ефективні теорії можна, використовуючи операторну теорію збурень разом з наближенням сильного зв'язку. У дисертації розглянуто два випадки орієнтації зовнішнього магнітного поля: 1) зовнішнє магнітне поле спрямоване вздовж осі z і 2) зовнішнє магнітне поле спрямоване вздовж осі x . У першому випадку виходитимемо з гамільтоніана (10) з $\alpha = z$. Для випадку, коли магнітне поле прикладено вздовж осі x , зробимо унітарне перетворення вихідного гамільтоніана (10), яке еквівалентне повороту системи координат навколо осі y на кут $\frac{\pi}{2}$, і прийдемо до гамільтоніана з анізотропною взаємодією в магнітному полі, спрямованому вздовж осі z :

$$H = \sum_{(ij)} J_{ij} [\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + (\Delta - 1) s_i^x s_j^x] - h \sum_i s_i^z. \quad (11)$$

Коли сильне магнітне поле прикладено вздовж осі z , маємо справу з такими двома станами на вертикальному зв'язку: повністю поляризованим станом $|u\rangle = |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle$ і одномагнетним станом $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)$ з енергіями $\varepsilon_u = \Delta \frac{J_2}{4} - h$ та $\varepsilon_d = -\frac{J_2}{2} - \frac{\Delta J_2}{4}$, відповідно. Тоді ефективний гамільтоніан є таким:

$$H_{\text{eff}} = \sum_m \left[C - h T_m^z + J (T_m^x T_{m+1}^x + T_m^y T_{m+1}^y) \right],$$

$$J = \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \quad h = h - h_1 - \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \quad h_1 = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J, \quad J = \frac{J_3 + J_1}{2}. \quad (12)$$

Коли магнітне поле прикладено вздовж осі x , виходитимемо з гамільтоніана (11). У сильному магнітному полі маємо справу з такими двома станами $|u\rangle$ та $|d\rangle$ на кожному вертикальному зв'язку: $|u\rangle = \alpha |\uparrow_1 \uparrow_2\rangle + \beta |\downarrow_1 \downarrow_2\rangle$, $|d\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_1 \downarrow_2\rangle - |\downarrow_1 \uparrow_2\rangle)$, де константи α і β в залежності від значення параметра анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга набувають різних значень; їх явний вигляд приведений в дисертації. Ефективний гамільтоніан для фрустрованого ромбічного спінового XXZ ланцюжка Гайзенберга в магнітному полі, прикладеному вздовж осі x , має вигляд:

$$H_{\text{eff}} = \sum_m \left(C - h T_m^z + J^x T_m^x T_{m+1}^x + J^y T_m^y T_{m+1}^y \right), \quad (13)$$

$$h = (h - h_0 - J)(\alpha^2 - \beta^2) - \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha^2 - \beta^2) \Delta + \frac{8(h - h_0 - J)^2}{(3 + \Delta)J_2} \alpha^2 \beta^2,$$

$$J^x = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha - \beta)^2 \Delta^2, \quad J^y = \frac{(J_3 - J_1)^2}{4h_0} (\alpha + \beta)^2. \quad (14)$$

В границі $\Delta \rightarrow 1$ отримані ефективні гамільтоніани (12) і (13), (14) збігаються; вони відповідають (нефрустрованому) спін- $\frac{1}{2}$ ізотропному XY ланцюжку в поперечному магнітному полі і збігаються з (6).

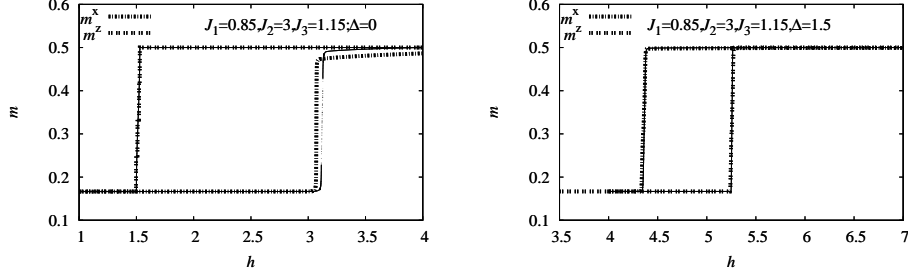


Рис. 6: Криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка Гайзенберга з параметрами $J_1 = 0.85$, $J_3 = 1.15$, $J_2 = 3$, $\Delta = 0$ (ліва панель) і $\Delta = 1.5$ (права панель) в магнітному полі, прикладеному вздовж осей z (пунктирна крива) та x (пунктирна крива). Тонкі криві – результати на основі ефективної моделі з використанням ферміонізації Йордана-Вігнера для безмежно великих систем.

Для дослідження отриманих ефективних моделей (12) і (13), (14) проведено порівняння їх передбачень з даними для вихідних моделей. Розглянуто низькотемпературні криві намагніченості фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка у магнітному полі, прикладеному вздовж осі x та вздовж осі z , див. рис. 6. Такі криві отримано з допомогою методу точної діагоналізації. При точній діагоналізації взято ланцюжок з $N = 12$ і $N = 15$ вузлів з періодичними граничними умовами і з параметрами $J_1 = J_3 = 1$ (ідеальна геометрія), $J_1 = 0.85$, $J_3 = 1.15$ (неідеальна геометрія), $J_2 = 3, 6$, $\Delta = 0 \dots 3$ при низькій температурі $T = 0.001$. У магнітному полі, прикладеному вздовж осі x , значення насичення намагніченості досягається лише в границі $h \rightarrow \infty$, але існує таке h_* , що при $h = h_* + 0$ значення намагніченості вже близьке до $\frac{1}{2}$. Вираз для h_* знайдено в дисертації. Коли магнітне поле прикладене вздовж осі z , то

$$h_*^z = \frac{1 + \Delta}{2} J_2 + \Delta J + \frac{(J_3 - J_1)^2}{2(1 + \Delta)J_2}. \quad (15)$$

Відповідно, для поля, прикладеного вздовж осі x , маємо

$$h_*^x \approx \sqrt{\frac{1 + \Delta}{2}} J_2 + J + \frac{(J_3 - J_1)^2}{4 \sqrt{\frac{1 + \Delta}{2}} J_2} \Delta. \quad (16)$$

Ці формули справедливі і для випадку $0 \leq \Delta < 1$, і для випадку $\Delta > 1$. З допомогою формул (15) та (16) можна оцінити величину параметра анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга Δ для азуриту на основі експериментальних даних [H. Kikuchi, et

al. Phys. Rev. Lett., 2006, **97**, 089702]. Теоретичне передбачення для параметра анізотропії обмінних взаємодій Гайзенберга у азуриті є $\Delta \approx 0.84 \dots 0.85$.

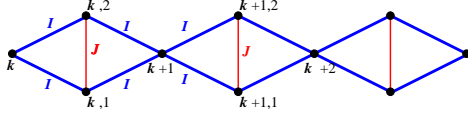


Рис. 7: Фрустрований ромбічний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга з взаємодіями Ізинга I та взаємодіями Гайзенберга J , див. (17).

У **п'ятому розділі** дисертації розглянуто узагальнення геометрично фрустрованого спин- $\frac{1}{2}$ ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга, для якого на вертикальному зв'язку є обмінна взаємодія Гайзенберга, а на решті зв'язків – обмінні взаємодії Ізинга, див. рис. 7. Гамільтоніан $s = \frac{1}{2}$ моделі Ізинга-Гайзенберга на фрустрованому ромбічному ланцюжку має такий вигляд:

$$H_0 = \sum_{k=1}^N H_{k,k+1}, \quad H_{k,k+1} = I(\mu_k^z + \mu_{k+1}^z)(s_{k,1}^z + s_{k,2}^z) + J\mathbf{s}_{k,1} \cdot \mathbf{s}_{k,2} - h(\mu_k^z + s_{k,1}^z + s_{k,2}^z), \quad (17)$$

де $I > J > 0$. Така модель є точно розв'язна [L. Čanová, J. Strečka, and M. Jaščur, J. Phys.: Condens. Matter, 2006, **18**, 4967]. Далі, додаємо малу XY частину до взаємодій Ізинга: $H_0 \rightarrow H = H_0 + V$, де

$$V = \sum_{k=1}^N V_{k,k+1}, \quad V_{k,k+1} = \frac{\delta I}{2} [(\mu_k^+ + \mu_{k+1}^+)(s_{k,1}^- + s_{k,2}^-) + (\mu_k^- + \mu_{k+1}^-)(s_{k,1}^+ + s_{k,2}^+)] \quad (18)$$

і $\delta < 1$ є малим параметром. Тепер спінова модель вже не може бути розв'язана точно. Використовуючи операторну теорію збурень, у дисертації побудовано ефективний гамільтоніан, який описує низькоенергетичну поведінку вже цілком квантової версії початкової моделі. Побудова ефективного гамільтоніана залежить від набору основних станів гамільтоніана H_0 , які залежать від величини зовнішнього магнітного поля h .

У випадку сильних магнітних полів ефективний гамільтоніан має вигляд:

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

$$C = \frac{J}{4} - h - \frac{3\delta^2 I}{8}, \quad h_{\text{eff}} = h - 2I - \frac{\delta^2 I}{2}, \quad J_{\text{eff}} = -\delta^2 I, \quad J_{\text{eff}}^z = \frac{\delta^2 I}{2}. \quad (19)$$

Отримана ефективна модель (19) є спин- $\frac{1}{2}$ XXZ ланцюжок Гайзенберга у повздовжньому магнітному полі (прикладеному вздовж осі z). Порівняно з початковою моделлю, ефективна модель містить лише $\mathcal{N} = N/3$ вузлів і є нефрустрованою. У випадку малих магнітних полів ефективний гамільтоніан дуже простий:

$$H_{\text{eff}} = \mathcal{N} \left(-I + \frac{J}{4} - \frac{\delta^2 I}{2} - hT^z \right). \quad (20)$$

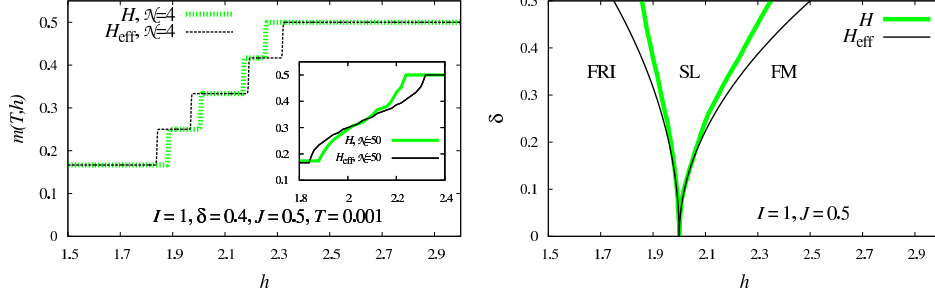


Рис. 8: Ліва панель: низькотемпературні криві намагніченості $m(T, h)$ в залежності від магнітного поля h для початкової моделі (17), (18) (товсті криві) та ефективної моделі (19) (тонкі криві). Права панель: фазова діаграма моделі (17), (18) в площині h - δ при $T = 0$. На фазовій діаграмі: ферімагнітна фаза (FRI), фаза спінової рідини (SL) та повністю намагнічена фаза (FM).

Для перевірки точності ефективних моделей, виконано розрахунки методом точної діагоналізації і методом ренормалізаційної групи для матриці густини. Обчислено намагніченість $m(T, h)$ при низьких температурах і сильних магнітних полях. З рис. 8, бачимо, що як тільки δ трохи відрізняється від 0, то стрибок кривої намагніченості при $h = 2I$ між однією третьою значення насичення намагніченості $m_{\text{sat}} = m(0, \infty) = \frac{1}{2}$ та насиченням намагніченості m_{sat} розмивається, тобто існує область магнітних полів $h_l \leq h \leq h_n$, в якій стрибок кривої намагніченості при нульовій температурі, перетворюється у стрімко змінну криву. Ефективна теорія добре описує таку поведінку намагніченості до $\delta = 0.3$. Наявність такого фрагменту у кривій намагніченості свідчить про виникнення безщільної фази спінової рідини перед тим, як намагніченість досягає насичення. На рис. 8 справа показана фазова діаграма ромбічного спінового ланцюжка Ізинга-Гайзенберга в h - δ площині при $T = 0$, яка була отримана з використанням методу ренормалізаційної групи для матриці густини для початкової моделі (для ефективної моделі показано аналітичний результат).

В **шостому розділі** дисертації розглянуто спін- $\frac{1}{2}$ антиферромагнітну XXZ модель Гайзенберга у двовимірній системі слабо взаємодіючих ромбічних ланцюжків у магнітному полі. Досліджено, як врахування міжланцюжкових взаємодій змінить фізику, зумовлену локалізованими магнонами, коли мова йде про ланцюжки, що допускають існування локалізованих магنونів. Використовуючи наближення силь-

ного зв'язку, побудовано ефективний гамільтоніан для такої системи:

$$\begin{aligned}
H_{\text{eff}} &= \mathcal{N}C + \sum_{(mn)} J_{mn} (T_m^x T_n^x + T_m^y T_n^y) - h \sum_{m=1}^{\mathcal{N}} T_m^z, \\
J_h &= J_{m_x, m_y; m_x+1, m_y} = \frac{(J_1 - J_3)^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \quad J_v = J_{m_x, m_y; m_x, m_y+1} = \frac{J_4(J_1 - J_3)}{(1 + \Delta)J_2}, \\
J_d &= J_{m_x, m_y; m_x+1, m_y-1} = -\frac{J_4(J_1 - J_3)}{(1 + \Delta)J_2}, \quad J_D = J_{m_x, m_y+1; m_x+1, m_y-1} = \frac{J_4^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \\
h &= h - h_1 - \frac{(J_1 - J_3)^2 + J_4^2}{2(1 + \Delta)J_2}, \quad h_1 = \frac{1 + \Delta}{2}J_2 + \Delta \frac{J_1 + J_3 + J_4}{2}.
\end{aligned} \tag{21}$$

Отримана ефективна модель (21) є (псевдо)спін- $\frac{1}{2}$ ізотропна XY модель на квадратній ґратці в поперечному магнітному полі. Незважаючи на те, що ефективна модель містить чотири різних обмінних взаємодії, вона є нефрустрованою. В граничному випадку, коли $J_4 = 0$, рівняння (21) збігається з результатами, які були отримані раніше в розділі 3. В дисертації проаналізовано кілька інших граничних випадків.

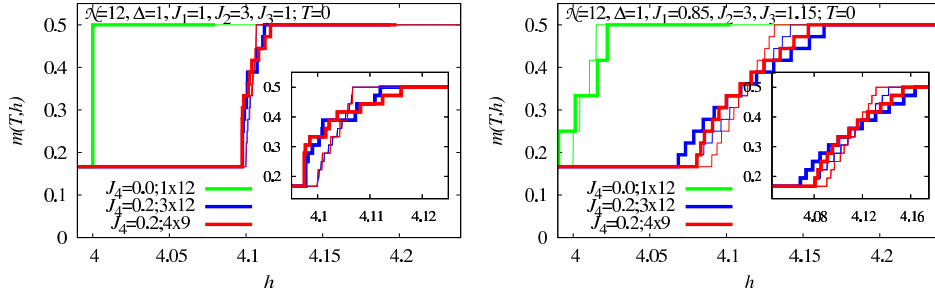


Рис. 9: Криві намагніченості $m(T = 0, h)$ для набору параметрів $\Delta = 1, J_2 = 3, J_1 = J_3 = 1$ (ідеальна геометрія, ліва панель), $J_1 = 0.85, J_3 = 1.15$ (деформована геометрія, права панель), $J_4 = 0$ і $J_4 = 0.2$. Дані точної діагоналізації стосуються системи, яка складається з $N = 36$ вузлів (вихідна модель) або з $N = 12$ вузлів (ефективна модель) з періодичними граничними умовами. Товсті лінії відповідають даним вихідних моделей, тонкі криві позначають результати для ефективної моделі.

Для оцінки області застосовності отриманої ефективної моделі (21) використано метод точної діагоналізації для (періодичних) скінченних систем. Розглянуто вихідну модель, яка складається з $N = 36$ вузлів, що відповідає або 1) 3 ромбічним ланцюжкам з 12 вузлів, або 2) 4 ромбічним ланцюжкам з 9 вузлів з набором параметрів

$J_2 = 3, J_1 = J_3 = 1$ (ідеальна геометрія), $J_1 = 0.85, J_3 = 1.15$ (деформована геометрія) і $\Delta = 1$. На рис. 9 приведено криві намагніченості для вихідної та отриманої ефективної моделей. Як видно з рис. 9, стрибок кривої намагніченості до насичення – характерна особливість кривої намагніченості завдяки існуванню локалізованих магنونів в системі – розмивається, якщо $J_4 \neq 0$. Розмиття стрибка кривої намагніченості в режимі низьких температур в околі поля насичення може бути спричиненим і неідеальною геометрією ґратки, і міжланцюжковими взаємодіями.

Основні результати та висновки

1. Запропоновано евристичний анзац для статистичної суми деформованого фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка при низьких температурах і сильних магнітних полях. Це дозволило отримати вільну енергію деформованого фрустрованого ромбічного спінового ланцюжка. Таку наближену аналітичну теорію можна застосувати і до інших спінових систем (наприклад, димер-плакетного ланцюжка чи ґратки квадратне кагоме). Результати опубліковано в [1].
2. Досліджено $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітну модель Гайзенберга на кількох фрустрованих ґратках (ромбічний і димер-плакетний ланцюжки, а також ґратка квадратне кагоме) з майже бездисперсійними одномагنونними станами. Розроблено систематичну теорію для пояснення низькотемпературних властивостей даних моделей в сильному магнітному полі за умови малих відхилень від ідеальної геометрії (коли магнетонні зони строго бездисперсійні). Побудовані ефективні моделі є значно простішими ніж вихідні і їх набагато легше досліджувати аналітично чи чисельно. Результати опубліковано в [2,3].
3. У двовимірному випадку вказано квантову спінову систему, в якій реалізується фазовий перехід Березінського-Костерліца-Таулеса. Результати опубліковано в [2,3].
4. Врахувавши анізотропію обмінних взаємодій Гайзенберга та довільність напрямку прикладеного зовнішнього магнітного поля, побудовано ефективні моделі для ромбічного спінового ланцюжка, які працюють при низьких температурах і сильних магнітних полях. З допомогою точної діагоналізації побудовані криві намагніченості для вихідної та отриманих ефективних моделей, що дозволило з'ясувати застосовність ефективного опису. Отримані ефективні моделі застосовано для пояснення експериментальних даних для природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. Результати опубліковано в [4,5].
5. Для квантового узагальнення точно розв'язного спін- $\frac{1}{2}$ геометрично фрустрованого ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга до взаємодій Ізинга додано малу XY частину. Побудовано ефективний гамільтоніан, який описує низькотемпературну поведінку повністю квантової моделі в широкому інтервалі магнітних полів. Використовуючи точну діагоналізацію і метод ренормалізаційної групи для матриці густини, досліджено поведінку намагніченості та низькотемпературну поведінку теплоємності для вихідної та ефективної

моделей. Показано, що додавання ХУ частини призводить до появи фази спінової рідини, в якій польова залежність намагніченості змінюється неперервно, між ферімагнітною фазою з намагніченістю $\frac{1}{3}$ намагніченості насичення і повністю намагніченою фазою. Результати опубліковано в [6].

6. Для системи фрустрованих ромбічних спінових ланцюжків зі слабкою міжланцюжковою взаємодією запропоновано ефективний опис в наближенні сильного зв'язку. Методом точної діагоналізації досліджено криві намагніченості для вихідної та ефективних моделей. Показано, що за наявності міжланцюжкових взаємодій в системі стрибок кривої намагніченості, зумовлений локалізованими магнонами, розмивається. Результати опубліковано в [7].

Результати дисертації опубліковано в таких роботах:

1. Derzhko, O. Semiquantitative theory for high-field low-temperature properties of distorted diamond spin chain / O. Derzhko, J. Richter, and O. Krupnitska // *Condens. Matter Phys.* – 2012. – Vol. 15, no. 4. – Pp. 43702-1-10.
2. Derzhko, O. Frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets at high magnetic fields: Beyond the flat-band scenario / O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, and T. Krokhnalskii // *Phys. Rev. B* – 2013. – Vol. 88, no. 9. – Pp. 094426-1-14.
3. Derzhko, O. The square-kagome quantum Heisenberg antiferromagnet at high magnetic fields: The localized-magnon paradigm and beyond / O. Derzhko, J. Richter, O. Krupnitska, and T. Krokhnalskii // *Low Temp. Phys.* – 2014. Vol. 40, no. 6. – Pp. 513–520.
4. Richter, J. Frustrated diamond-chain quantum XXZ Heisenberg antiferromagnet in a magnetic field / J. Richter, O. Krupnitska, T. Krokhnalskii, and O. Derzhko // *J. Magn. Magn. Mater.* – 2015. – Vol. 379. – Pp. 39–44.
5. Крупницька, О. Вплив анізотропії обмінної взаємодії Гайзенберга на процес намагнічення фрустрованого ромбічного ланцюжка у сильному магнітному полі // *Укр. фіз. журн.* – 2015. – Т. 60, № 1. – С. 1245-1252.
6. Derzhko, O. Effective low-energy description of almost Ising-Heisenberg diamond chain / O. Derzhko, O. Krupnitska, B. Lisnyi, and J. Strečka // *Europhys. Lett.* – 2015. – Vol. 112. – Pp. 37002-6.
7. Krupnitska, O. Localized-magnon chains and interchain interactions / O. Krupnitska, J. Richter, and O. Derzhko // *Lviv, 2016.* – (Prepr. / National Academy of Sciences of Ukraine. Inst. for Condens. Matter Phys.; ICMP-16-07E).
8. Крупницька, О. Низькотемпературна термодинаміка ромбічного спінового ланцюжка у сильному магнітному полі // XII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 30 травня – 1 червня, 2012 р. Тези доповідей. – Львів: 2012. – С. 31.
9. Krupnitska, O. High-field low-temperature properties of distorted diamond chain / O. Derzhko, J. Richter, and O. Krupnitska // *The 4-th Conference “Statistical Physics: Modern Trends and Applications”, Lviv, July 3–6, 2012. Book of Abstracts.* – Lviv: 2012. – P. 131.

10. Крупницька, О. Низькотемпературні властивості деформованого ромбічного спінового ланцюжка у сильному магнітному полі // “Актуальні проблеми теоретичної, експериментальної та прикладної фізики”, Тернопіль, 20–22 вересня 2012 р. Матеріали всеукраїнської наукової конференції. – Тернопіль: ТНТУ, 2012. – С. 150.
11. Крупницька, О. Низькотемпературні властивості деяких фрустрованих антиферромагнетиків Гайзенберга в сильних магнітних полях // XIII Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 5–7 червня, 2013 р. Тези доповідей. – Львів: 2013. – С. 43.
12. Krupnitska, O. Low-temperature thermodynamics of some flat-band quantum anti-ferromagnets at high magnetic fields // V Young Scientists Conference “Problems of Theoretical Physics”, Kyiv, December 24–27, 2013. Book of Abstracts. – Kyiv: 2013. – P. 39.
13. Крупницька, О. Фрустрований ромбічний XXZ ланцюжок Гайзенберга у довільно орієнтованому зовнішньому магнітному полі // XIV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 4–6 червня, 2014 р. Тези доповідей. – Львів: 2014. – С. 37.
14. Крупницька, О. Низькотемпературні властивості майже ідеально фрустрованої магнітної сполуки $Ba_2CoSi_2O_6Cl_2$ у сильному магнітному полі // XV Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 4–5 червня, 2015 р. Тези доповідей. – Львів: 2015. – С. 27.
15. Крупницька, О. Локалізовані магнони в ромбічному ланцюжку і міжланцюжкові взаємодії // XVI Всеукраїнська школа-семінар та Конкурс молодих вчених зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, Львів, 9–10 червня, 2016 р. Тези доповідей. – Львів: 2016. – С. 27.

АНОТАЦІЯ

Крупницька О.М. Фрустровані квантові антиферромагнетики Гайзенберга. Поблизу парадигми локалізованих магнів. – На правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика, Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України, Львів, 2017.

Дисертаційна робота присвячена дослідженню властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гайзенберга, які допускають існування локалізованих магнів в сильних магнітних полях та при низьких температурах. Розглянуто $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнітну модель Гайзенберга на кількох фрустрованих ґратках (ромбічний і димер-плакетний спінові ланцюжки та ґратка квадратне кагоме) з майже бездисперсійними (майже плоскими) магнонними станами з найменшою

енергією за наявності сильного магнітного поля. Для цих систем, використовуючи операторну теорію збурень, побудовано низькотемпературні ефективні гамільтоніани в наближенні сильного зв'язку та в підході локалізованих магніонів. Отримані ефективні моделі застосовано для пояснення деяких властивостей фрустрованих квантових антиферромагнетиків Гейзенберга в режимі сильних магнітних полів та низьких температур. Зокрема, обговорено криву намагніченості природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, який можна розглядати як модель деформованого ромбічного спінового ланцюжка.

У дисертації вивчено як видозміниться теорія локалізованих магніонів при врахуванні неідеальної геометрії, анізотропії обмінних взаємодій і довільного напрямку зовнішнього магнітного поля чи наявності міжланцюжкових взаємодій.

Ключові слова: квантовий антиферромагнетик Гейзенберга, геометрична фрустрація, локалізовані магніони, азурит

АННОТАЦІЯ

Крупницька О.М. Фрустрированные квантовые антиферромагнетики Гейзенберга. Вблизи парадигмы локализованных магненов. – На правах рукописи.

Диссертация на соискание научной степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика, Институт физики конденсированных систем Национальной академии наук Украины, Львов, 2017.

Диссертационная работа посвящена исследованию свойств фрустрированных квантовых антиферромагнетиков Гейзенберга, которые допускают существование локализованных магненов в сильных магнитных полях и при низких температурах. Рассмотрена $s = \frac{1}{2}$ антиферромагнитная модель Гейзенберга на нескольких фрустрированных решетках (ромбическая и димер-плакетная спиновые цепочки и решетка квадратное кагоме) с почти бездисперсионными (почти плоскими) магнанными состояниями с наименьшей энергией при наличии сильного магнитного поля. Для этих систем, используя операторную теорию возмущений, построено низкотемпературные эффективные гамильтонианы в приближении сильной связи и в подходе локализованных магненов. Полученные эффективные модели применены для объяснения некоторых свойств фрустрированных квантовых антиферромагнетиков Гейзенберга в режиме сильных магнитных полей и низких температур. В частности, обсуждается кривая намагнитченности естественного минерала азурита $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, который можно рассматривать как модель деформированной ромбической спиновой цепочки.

В диссертации изучается, как изменится теория локализованных магненов при учете неидеальной геометрии, анизотропии обменных взаимодействий и произвольного направления внешнего магнитного поля или наличия взаимодействий между цепочками.

Ключевые слова: квантовый антиферромагнетик Гейзенберга, геометрическая фрустрация, локализованные магненоны, азурит

ABSTRACT

Krupnitska O.M. Frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets. Around the localized-magnon paradigm. – Manuscript.

Thesis on search of the scientific degree of candidate of physical and mathematical sciences, speciality 01.04.02 – theoretical physics, Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine, Lviv, 2017.

The thesis is devoted to investigation of the spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic Heisenberg model on several frustrated one- and two-dimensional lattices (the diamond chain, the dimer-plaquette chain and the two-dimensional square-kagome lattice) with almost dispersionless (almost flat) lowest magnon band in the presence of a magnetic field. If the band is strictly flat, the thermodynamics of the model can be studied in detail in the low-temperature high-field regime after mapping the problem onto classical hard-core lattice-gas models. The aim of our study is to develop a systematic theory of the low-temperature high-field properties of the models using the concept of localized magnons. Obviously, exact localization of the magnons is not implemented in nature. That is why it is necessary to determine the behavior of spin models with parameters which almost satisfies the conditions of localization. For these systems we construct the low-energy effective Hamiltonians which are much simpler than the initial ones. For this purpose, we apply the standard strong-coupling perturbation theory and a localized-magnon approach which is valid in a wider range of parameters [Phys. Rev. B **88**, 094426 (2013)].

To analyze the region of the applicability of the obtained effective Hamiltonians we perform extensive exact-diagonalization calculations and compare them with the results for the initial models. We examine the constructed effective models to explain some properties of the frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets in the regime of high magnetic fields and low temperatures. In two-dimensional case the effective models exhibit the Kosterlitz-Thouless phase transition which should emerge in the initial frustrated quantum model (e.g., square-kagome Heisenberg antiferromagnet) at low temperature in the vicinity of the saturation field.

Furthermore, we discuss the influence of Heisenberg exchange interaction anisotropy on magnetization process of frustrated diamond chain in a strong magnetic field. We examine how anisotropic Heisenberg interaction modifies the theory of localized magnon, if the external applied magnetic field has an arbitrary direction. We also investigate effects of interchain interactions on localized-magnon physics.

Moreover, we apply our analysis to the natural mineral azurite $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, the magnetic properties of which can be explained within the spin- $\frac{1}{2}$ antiferromagnetic Heisenberg diamond spin-chain model with slightly dispersive lowest magnon band. Our theoretical predictions may be of interest for interpreting the high-field low-temperature measurements for azurite.

Keywords: quantum Heisenberg antiferromagnet, geometrical frustration, localized magnons, azurite