

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Інститут фізики конденсованих систем Національної академії наук України

Кваліфікаційна наукова
праця на правах рукопису

ВЕРХОЛЯК Тарас Михайлович

УДК 537.61, 531.19, 530.145.83

ДИСЕРТАЦІЯ

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


01.04.02 — теоретична фізика

(104 — фізика та астрономія)

10 — природничі науки

Подається на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук

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

 Т. М. Верхоляк

Науковий консультант Держко Олег Володимирович, доктор фіз.-мат. наук,
професор

Львів — 2024

АНОТАЦІЯ

Верхоляк Т.М. Квантові флуктуації та фрустрації у низьковимірних спінових моделях: точні результати і пертурбативний аналіз. — Кваліфікаційна наукова праця на правах рукопису.

Дисертація на здобуття наукового ступеня доктора фізико-математичних наук (доктора наук) за спеціальністю 01.04.02 «Теоретична фізика» (104 — Фізика та астрономія). — Інститут фізики конденсованих систем НАН України, Львів, 2024.

Представлена дисертаційна робота стосується вивчення ефектів квантових флуктуацій і фрустрацій на динамічні та низькотемпературні властивості низьковимірних квантових спінових моделей.

Розглянуто спін-1/2 анізотропний XU ланцюжок у поперечному (z) полі з взаємодією Дзялошинського-Морія, спрямованою вздовж осі z у спіновому просторі, для вивчення впливу цієї антисиметричної взаємодії на zz , xx і yy динамічні структурні фактори. Використовуючи підхід ферміонізації Йордана-Вігнера, аналітично обчислюється поперечний динамічний структурний фактор, який визначається двоферміонним континуумом збуджень. Інші динамічні структурні фактори, які визначаються багатферміонними збудженнями, розраховано числовим методом. У випадку ізотропного XX ланцюжка взаємодія Дзялошинського-Морія якісно змінює xx (yy) і xy (yx) динамічні структурні фактори. Ці результати застосовано до пояснення експериментів з електронного спінового резонансу. У zz динамічних величинах, але ізотропного XX ланцюжка, ця антисиметрична взаємодія веде лише до перенормування взаємодії. Навпаки, у випадку анізотропного XU ланцюжка, zz динамічний структурний фактор є набагато чутливішим і має додаткові сингулярності ван Гова не тільки з показником 1/2, але також з 2/3.

Досліджено динамічні структурні фактори спін-1/2 ланцюжків із взаємодією найближчих сусідів типу XX та Дзялошинського-Морія, і з періодичними та випадковими змінами знака цих взаємодій. Цей особливий вид неоднорідності можна усунути з гамільтоніана відповідним перетворенням “повороту”. У результаті

динамічні структурні фактори періодичних або випадкових ланцюжків обчислюються з відповідних виразів для однорідних ланцюжків. Використовуючи точні аналітичні та числові результати для однорідних систем проілюстровано вплив регулярного чергування або випадкового безладу на динамічні структурні фактори таких квантових спінових ланцюжків.

Перетворення Йордана-Вігнера застосовано до дослідження основного стану та магнітних властивостей двох спін-1/2 фрустрованих моделей: $J_1 - J_2$ XXZ ланцюжка і XXZ моделі на ромбічному ланцюжку. Розглядаються різні розв'язки наближення Гартрі-Фока (або середнього поля) для трансформованого гамільтоніана ланцюжка $J_1 - J_2$ XXZ . Енергія основного стану та статичний структурний фактор порівнюються з додатковою точною діагоналізацією, і знайдено добре узгодження біля границі моделі Маджумдара-Гоша. Показано, що неспівмірний основний стан відсутній для великих J_2 у повністю самоузгодженому аналізі середнього поля. Гамільтоніан квантової спін-1/2 XXZ моделі на ромбічному ланцюжку представлено в термінах безспінових ферміонів за наявності калібрувального поля та розглянуто різні калібрувально-інваріантні способи задання спін-ферміонних перетворень. Після фіксації відповідного калібрування розгляд взаємодіючих доданків у ферміонному гамільтоніані базується на розщепленні типу Гартрі-Фока. Ми обговорюємо магнітні властивості цієї квантової спінової моделі при нульових і відмінних від нуля температурах і аналізуємо справедливість використаного наближення шляхом порівняння з результатами методу точної діагоналізації для скінченних (до 36 спінів) ланцюжків.

Детально розглядається поведінка основного стану фрустрованої квантової спін-1/2 двонової драбинки з взаємодією Гайзенберга на щаблях та взаємодією Ізинга між спінами на сусідніх щаблях. За допомогою представлення станів на зв'язках або унітарного перетворення модель можна переформулювати як квантовий ланцюжок Ізинга з композитними спінами в ефективному поперечному та поздовжньому полі. Показано, що основний стан такої драбинки Гайзенберга-Ізинга можна вивести з трьох точно розв'язних моделей: квантового ланцюжка Ізинга в поперечному полі, "класичного" ланцюжка Ізинга в поздовжньому полі

або моделі спінового ланцюжка у полі, яке чергується в поздовжньому і поперечному напрямку. Ефект анізотропії прослідковується шляхом розгляду квантової двонової драбинки з XUZ взаємодією Гайзенберга на щаблях та взаємодією Ізинга між спінами на сусідніх щаблях. Випадок повністю фрустрованої драбинки Ізинга-Гайзенберга зі спіном $1/2$, яку можна альтернативно розглядати як тетраедричний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга, точно розв'язується в поздовжньому магнітному полі, використовуючи локальне збереження повного спіну на кожному щаблі та метод трансфер матриці. В результаті, точно розраховуються фазова діаграма основного стану, процес намагнічування, магнетокалоричний ефект і основні термодинамічні величини. Розширення драбинки Гайзенберга-Ізинга на наявність зовнішнього електричного поля досліджено з урахуванням магнетоелектричного механізму Кацури-Нагаоши-Балацького. Показано, що прикладене електричне поле може контролювати квантовий фазовий перехід між упорядкованою фазою Нееля та неупорядкованою парамагнітною фазою.

Квантова спін- $1/2$ ортогонально-димерна модель в одному та двох вимірах із димерною взаємодією Гайзенберга та міждимерною Ізинговою взаємодією в магнітному полі розглядається в межах строгого підходу. Одновимірна модель зберігає z -компоненти повного спіну на вертикальних зв'язках Гайзенберга, і ця властивість використовується для точного розрахунку статистичної суми за допомогою методу матриці переносу. Знайдено фазову діаграму основного стану даної моделі в магнітному полі, а також макроскопічне виродження вздовж індукованих полем переходів, що супроводжуються стрибками намагніченості. Модель демонструє два проміжні дробові плато на $1/4$ та $1/2$ намагніченості насичення. Показано, як макроскопічне виродження основного стану відбивається на низькотемпературній поведінці намагніченості, ентропії та питомої теплоємності. Детально обговорюється можливість спостереження посилення магнетокалоричного ефекту під час адіабатичного розмагнічування. Для теоретичного опису $3d-4f$ гетеробіметалічного координаційного полімеру $[\text{Cu}_2 \text{Dy}_2]_n$ використовується спін- $1/2$ ортогональний димерний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга з двома різними g -факторами для спінів Ізинга та Гайзенберга.

Точні основні стани спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда (двовимірній ортогонально-димерній ґратці) з димерною взаємодією Гайзенберґа та міждимерною взаємодією Ізинґа знайдено за допомогою унітарного перетворення, що встановлює її відображення на ефективну класичну спінову модель. Модель демонструє криву намагніченості при нульовій температурі лише з двома проміжними плато на $1/3$ та $1/2$ намагніченості насичення, які відповідають стрічковому та шаховому порядку синглетів та поляризованих триплетів.

Використовуючи точні результати для моделей Ізинґа-Гайзенберґа з сильними димерними взаємодіями, запропоновано підхід сильного зв'язку, заснований на теорії збурень для XU частини міждимерної взаємодії. Наближені результати для спін-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Гайзенберґа, отримані за допомогою такого підходу сильного зв'язку, є у добрій згоді з числовими даними, отриманими в рамках методу точної діагоналізації та ренормгрупи для матриці густини. Для спін-1/2 моделі Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда ефективна модель взаємодіючих триплетних збуджень із розширеним жорстким відштовхуванням отримується в рамках запропонованого підходу сильного зв'язку. Він точно встановлює $1/8$, $1/6$ і $1/4$ плато намагніченості, які спостерігаються в магнітних властивостях шаруватої сполуки $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$. Крім цього, виявлено можливу реалізацію квантової фази зв'язаних триптонів при досить низьких магнітних полях. Зазначений підхід застосовано до спін-1/2 антиферомагнітного тримеризованого ланцюжка Гайзенберґа із сильними димерними зв'язками та слабкими мономер-димерними взаємодіями та отримано задовільний опис його експериментальної реалізації у сполуці $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$.

Спін-1/2 та змішаний спін-(1,1/2) октаедричні ланцюжки Гайзенберґа з регулярним чергуванням мономерних спінів і спінових плакеток досліджено різними аналітичними та числовими методами: варіаційним підходом, методом локалізованих магнонів, точною діагоналізацією та ренормгрупою для матриці густини. Модель належить до класу плоскостонних систем і має багату фазову діаграму основного стану, включаючи фази зі спонтанно порушеною трансляційною симетрією. Крім того, вона демонструє аномальну низькотемпературну термодинамі-

ку поблизу квантових фазових переходів, керованих полем. Змішаний спін-(1,1/2) ланцюжок додатково характеризується появою фрагментованих кластерних фаз Голдейна.

Двовимірні версії квантових моделей на декорованих ґратках можуть демонструвати складні структури в основному стані, а також температурні фазові переходи за різних умов. Використовуючи комбінацію аналітичних аргументів, ренормгрупи для матриці густини, точної діагоналізації, а також квантового методу Монте-Карло, досліджуються властивості спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберґа на фрустрованій квадратній ґратці, декорованій ромбами, при наявності скінченного магнітного поля, які стосуються як фазової діаграми основного стану, так і термодинамічних властивостей. При проміжних полях виявлено лінію квантового фазового переходу першого роду між феримагнітною і мономер-димерною фазами. Ця лінія першого порядку простягається до скінченних температур, закінчуючись лінією критичних точок, які належать до класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа. Ці фазові переходи можна дослідити строго у випадку спрощеної спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами, у магнітному полі, яка розраховується за допомогою декораційно-ітераційного перетворення та класичного моделювання Монте-Карло. Узагальнене декораційно-ітераційне перетворення також застосовується до гібридної моделі на подвійно декорованій квадратній ґратці, яка має локалізовані спіни Ізинґа в центральних вузлах ґратки та незв'язані електрони, делокалізовані на парах декорованих вузлів. У припущенні половинного заповнення кожної пари декорованих вузлів досліджується спонтанний антиферромагнітний дальній порядок моделі, а також немонотонна залежність критичної температури від співвідношення між кінетичним доданком, одновузловим відштовхуванням і Ізинґовою взаємодією між локалізованими спінами і незв'язаними електронами.

Ключові слова: низьковимірні магнетики, динамічні властивості, фрустрації, плато дробової намагніченості, точні розв'язки.

ABSTRACT

Verkholyak T.M. Quantum fluctuations and frustrations in low-dimensional spin models: exact results and perturbative analysis. — Qualifying scientific work on the rights of the manuscript.

Thesis for the Degree of Doctor of Sciences in Physics and mathematics on the speciality 01.04.02 “Theoretical Physics” (104 — Physics and Astronomy). — 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 dynamic and low-temperature properties of low-dimensional quantum spin models.

The spin- $\frac{1}{2}$ anisotropic XY chain in a transverse (z) field with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction directed along z -axis in spin space is considered to examine the effect of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction on the zz , xx and yy dynamic structure factors. Using the Jordan-Wigner fermionization approach we analytically calculate the dynamic transverse spin structure factor which is governed by a two-fermion excitation continuum. Other dynamic structure factors which are governed by many-fermion excitations are calculated numerically. In the case of the isotropic XX chain, the xx (yy) and xy (yx) dynamic structure factors show dramatical changes owing to the Dzyaloshinskii-Moriya interaction. Implications of our results for electron spin resonance experiments are briefly discussed. This antisymmetric interaction does not manifest itself crucially in the zz dynamic quantities, and shows only the general effect of the interaction renormalization. On the contrary, zz dynamic structure factor is much more sensitive in case of the anisotropic XY chain, and may exhibit an additional van Hove singularities not only with exponent $1/2$ but also with $2/3$.

Dynamic structure factors of spin- $1/2$ chains with nearest-neighbor interactions of XX and Dzyaloshinskii-Moriya type, and with periodic or random changes in the sign of these interactions has been examined. This special kind of inhom-

geneity can be eliminated from the Hamiltonian by suitable transformation of the spin variables. As a result, the dynamic structure factors of periodic or random chains can be computed from those of the uniform chains. Using the exact analytical and precise numerical results available for the uniform systems we illustrate the effects of regular alternation or random disorder on dynamic structure factors of quantum spin chains.

The Jordan-Wigner transformation is applied to study the ground-state and magnetic properties of two quantum spin-1/2 frustrated models: the $J_1 - J_2$ XXZ chain and XXZ model on the diamond chain. We consider different solutions of the mean-field approximation for the transformed Hamiltonian of the $J_1 - J_2$ XXZ chain. Ground state energy and the static structure factor are compared with complementary exact diagonalization and good agreement is found near the limit of the Majumdar-Ghosh model. It is demonstrated that an incommensurate ground state is absent for large J_2 in a fully self-consistent mean-field analysis. The Hamiltonian of the quantum spin- $\frac{1}{2}$ XXZ model on the diamond chain is represented in terms of spinless fermions in the presence of a gauge field and different gauge-invariant ways of assigning the spin-fermion transformation are considered. A consideration of interaction terms in the fermionic Hamiltonian rests upon the Hartree-Fock procedure after fixing the appropriate gauge. We discuss the magnetic properties of this quantum spin model at zero as well as non-zero temperatures and analyze the validity of the approximation used through a comparison with the results of the exact diagonalization method for finite (up to 36 spins) chains.

Ground-state behaviour of the frustrated quantum spin-1/2 two-leg ladder with the Heisenberg intra-rung and Ising inter-rung interactions is examined in detail. The model is transformed to the quantum Ising chain with composite spins in an effective transverse and longitudinal field by employing either the bond-state representation or the unitary transformation. It is shown that the ground state of the Heisenberg-Ising ladder can be descended from three exactly solvable models: the quantum Ising chain in a transverse field, the “classical” Ising chain in a longitudinal field or the spin-chain model in a staggered longitudinal-transverse field. The effect

of the anisotropy is followed by considering the quantum spin-1/2 two-leg ladder with an XYZ Heisenberg intra-rung interaction and Ising inter-rung interactions. The case of the fully frustrated spin-1/2 Ising-Heisenberg ladder, which can be alternatively viewed as an Ising-Heisenberg tetrahedral chain, is exactly solved in a longitudinal magnetic field by taking advantage of the local conservation of the total spin on each rung and the transfer-matrix method. As a result, the ground-state phase diagram, magnetization process, magnetocaloric effect and basic thermodynamic quantities for the model are rigorously calculated. An extension of the spin-1/2 Heisenberg-Ising ladder on a presence of the external electric field is rigorously examined by taking into account the Katsura-Nagaosa-Balatsky magnetoelectric mechanism. It is shown that the applied electric field may control a quantum phase transition between the Néel (stripy) ordered phase and the disordered paramagnetic phase.

The quantum spin-1/2 orthogonal-dimer model in one and two dimensions with the Heisenberg intra-dimer and Ising inter-dimer interactions in a magnetic field is considered by a rigorous approach. The one-dimensional model conserves the z -component of total spin on vertical Heisenberg bonds and this property is used to calculate exactly the partition function using the transfer-matrix method. We have found the ground-state phase diagram of the given model in a magnetic field as well as the macroscopic degeneracy along field-induced transitions accompanied with the magnetization jumps. The model exhibits two intermediate fractional plateaux at one-quarter and one-half of the saturation magnetization. It is shown how the macroscopic degeneracy of the ground state is reflected in the low-temperature behavior of the magnetization, entropy and specific heat. A possibility of observing enhanced magnetocaloric effect during the adiabatic demagnetization is discussed in detail. 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 $3d-4f$ heterobimetallic coordination polymer $[\text{Cu}_2\text{Dy}_2]_n$.

Exact ground states of a spin-1/2 Ising-Heisenberg model on the Shastry-Sutherland (two-dimensional orthogonal-dimer) lattice with Heisenberg intra-dimer

and Ising inter-dimer couplings are found by the unitary transformation establishing a mapping correspondence with an effective classical spin model. The model exhibits a zero-temperature magnetization curve with just two intermediate plateaus at one-third and one-half of the saturation magnetization, which correspond to stripe and checkerboard orderings of singlets and polarized triplets, respectively.

Using the exact results for the Ising-Heisenberg models with the strong intradimer couplings, we suggested the strong-coupling approach based on the perturbative treatment of XY part of the inter-dimer interaction. The approximate results obtained from the strong-coupling approach are in excellent agreement with the state-of-the-art numerical data obtained for the spin-1/2 Heisenberg orthogonal-dimer chain within the exact diagonalization and density-matrix renormalization group method. For the spin-1/2 Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice the effective model of interacting triplet excitations with the extended hard-core repulsion is obtained within the suggested using this advanced type of the strong-coupling approach. It accurately recovers $1/8$, $1/6$ and $1/4$ magnetization plateaux observed in the magnetic properties of the layered compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. A possible existence of a striking quantum phase of bound triplons is also revealed at low enough magnetic fields. The mentioned approach is applied to the spin-1/2 antiferromagnetic Heisenberg trimerized chain with strong intradimer and weak monomer-dimer coupling constants, and the satisfactory description of its experimental realization $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$ is obtained.

The spin- $\frac{1}{2}$ and mixed spin-(1,1/2) Heisenberg octahedral chains with regularly alternating monomeric and square-plaquette sites is investigated using various analytical and numerical methods: variational technique, localized-magnon approach, exact diagonalization and density-matrix renormalization group method. The model belongs to the class of flat-band systems and it has a rich ground-state phase diagram including phases with spontaneously broken translational symmetry. Moreover, it exhibits anomalous low-temperature thermodynamics close to continuous or discontinuous field-driven quantum phase transitions. The mixed spin-(1,1/2) chain is additionally characterized by the emergent fragmentized cluster-based Haldane

phases.

Two-dimensional versions of the quantum models on decorated lattices may exhibit complex structures in the ground state, as well as temperature phase transitions under different conditions. Using a combination of analytical arguments, density matrix renormalization group, exact diagonalization, as well as sign-problem-free quantum Monte Carlo calculations, we investigate the properties of the spin-1/2 Heisenberg antiferromagnet on the frustrated diamond-decorated square lattice in the presence of a finite magnetic field, addressing both the ground-state phase diagram as well as several thermodynamic properties. At intermediate field strength, we identify a first-order quantum phase transition line between the ferrimagnetic and the monomer-dimer regime. 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. The generalized decoration-iteration transformation is adopted to treat exactly a hybrid model of doubly decorated two-dimensional lattices, which have localized Ising spins at their nodal lattice sites and itinerant electrons delocalized over pairs of decorating sites. Under the assumption of a half filling of each couple of the decorating sites, the model exhibits a spontaneous antiferromagnetic long-range order. It is studied how the critical temperature of the order phase depends on a ratio between the kinetic term, the on-site Coulomb repulsion and the Ising-type exchange interaction.

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

Список публікацій здобувача

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, Aki-

- noru 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. Krokhmalskii, 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. Krokhmalskii, 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.

ЗМІСТ

Вступ		24
1	Огляд літератури	35
1.1	Низьковимірні моделі та сильноскорельовані квантові фази	35
1.2	Сполуки	44
1.3	Методи	47
1.4	Проблеми	53
2	Динамічні властивості спін-1/2 XU ланцюжків з взаємодією Дзялошинського-Морія	59
2.1	Симетрії ізотропного XU ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія	60
2.2	Вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на динамічні структурні фактори	61
2.3	Спектр електронного спінового резонансу при наявності взаємодії Дзялошинського-Морія	67
2.4	Динамічні кореляції анізотропного XU ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія і континуум двоферміонних збуджень . . .	69
2.5	Висновки	79
3	Динаміка деяких регулярно-неоднорідних та випадкових спін-1/2 XU ланцюжків	81
3.1	Точно розв'язний XX ланцюжок з періодичною або випадковою змінною знаком взаємодії	81

3.2	Динамічний структурний фактор ланцюжків з неоднорідністю у знаку взаємодії	82
3.2.1	Періодичні ланцюжки	83
3.2.2	Випадкові ланцюжки	84
3.3	XU ланцюжки з неоднорідністю у знаку взаємодії Дзялошинського-Морія	87
3.4	Висновки	89
4	Фрустровані квантові драбинки і ферміонізація Йордана-Вігнера	91
4.1	Основний стан спін-1/2 XXZ зигзаг драбинки: ферміонізація Йордана-Вігнера та наближення Гартрі-Фока	92
4.2	Магнітні властивості спін-1/2 XX ромбічного ланцюжка	98
4.2.1	Різні способи ферміонізації для спін-1/2 XX ромбічного ланцюжка	100
4.2.2	Наближення Гартрі-Фока для дисторсного ромбічного ланцюжка	104
4.2.3	Наближення Гартрі-Фока для симетричного ромбічного ланцюжка	109
4.3	Вплив XXZ анізотропії на основний стан ромбічного ланцюжка . .	113
4.4	Висновки	115
5	Спін-1/2 двонога драбинка зі взаємодіями Гайзенберга та Ізинґа	118
5.1	Унітарне перетворення до димерного базису у моделі двонової драбинки	119
5.2	Основний стан спін-1/2 двонової драбинки зі взаємодіями Гайзенберга та Ізинґа	122
5.2.1	Фазова діаграма основного стану за відсутності магнітного поля	123

5.2.2	Фазова діаграма основного стану в магнітному полі	130
5.3	Точний розв'язок для тетраедричного ланцюжка	135
5.3.1	Фазова діаграма основного стану	139
5.3.2	Процес намагнічування	142
5.3.3	Магнітне охолодження	142
5.4	Модель магнетоелектрика на драбинці	143
5.4.1	Магнетоелектричний ефект за відсутності магнітного поля .	145
5.4.2	Магнетоелектричний ефект у магнітному полі	147
5.5	Висновки	149

6 Ортогонально-димерні моделі на одновимірних та двовимірних ґратках **152**

6.1	Точний розв'язок для ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа	153
6.1.1	Основний стан	156
6.1.2	Термодинаміка і магнетокалоричний ефект	163
6.1.3	Застосування до опису магнітних полімерних сполук $[Dy_2Cu_2]_n$	165
6.2	Ефективні моделі та теорія збурень для одновимірних моделей . . .	175
6.2.1	Дробові плато намагніченості та квантові фази ортогонально-димерного ланцюжка Гайзенберґа	176
6.2.2	Теорія збурень для тримеризованої моделі Гайзенберґа та теоретичний опис сполуки $Cu_3(P_2O_6OH)_2$	189
6.3	Точні основні стани для моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда	198
6.4	Теорія збурень за квантовою частиною міждиммерної взаємодії для моделі Шастри-Сазерленда	211
6.4.1	Ефективна модель триплонних збуджень	214
6.4.2	Квантова скорельована фаза зв'язаних триплонів	224
6.5	Висновки	226

7 Низьковимірні спінові та спін-електронні моделі на декорованих ґратках	231
7.1 Квантові фази і термодинаміка октаедричного ланцюжка	232
7.1.1 Основний стан та низькотемпературна термодинаміка спін- 1/2 октаедричного ланцюжка	243
7.1.2 Кластеризовані фази Голдейна у змішаному октаедричному ланцюжку	249
7.2 Квантова спінова модель на квадратній ґратці декорованій ромбами	258
7.2.1 Фазова діаграма моделі Гайзенберга	260
7.2.2 Температурні фазові переходи	267
7.2.3 Точні результати для гібридної моделі Ізинґа-Гайзенберга . .	272
7.3 Точний розв'язок для двовимірної гібридної моделі локалізованих спінів і колективізованих електронів	290
7.4 Висновки	294
Висновки	298
Список використаних джерел	301
А Список публікацій здобувача за темою дисертації	343
Б Апробація результатів дисертації	351

ПЕРЕЛІК УМОВНИХ СКОРОЧЕНЬ

DMRG	— density matrix renormalization group [method] — ([метод] ренорм-групи для матриці густини)
QMC	— quantum Monte Carlo [method] — (квантовий [метод] Монте-Карло)
$[\text{Cu}_2\text{Dy}_2]_n$	— гетеробіметалічний координаційний полімер — $\{\{\text{Dy}(\text{hfac})_2(\text{CH}_3\text{OH})\}_2\{\text{Cu}(\text{dmg})(\text{Hdmg})\}_2\}_n$ — (H_2dmg = dimethylglyoxime; — Hhfac = 1,1,1,5,5,5-hexafluoropentane-2,4-dione)
ESR	— electron spin resonance (електронний спіновий резонанс)
SD	— singlet-dimer [phase] (синглет-димерна [фаза])
ID	— Ising-dimer [phase] ([фаза] Ізингових димерів)
SB	— staggered-bond [phase] ([фаза] періодично-змінних зв'язків)
AF	— antiferromagnetic [phase] (антиферромагнітна [фаза])
FM	— ferromagnetic [phase] (ферромагнітна [фаза])
FRI	— ferrimagnetic [phase] (феримагнітна [фаза])
MAF	— modulated antiferromagnetic [phase] — (модульована антиферромагнітна [фаза])
MFI	— modulated ferrimagnetic [phase] (модульована феримагнітна [фаза])
MD	— monomer-dimer [phase] (мономер-димерна [фаза])
MT	— monomer-tetramer [phase] (мономер-тетрамерна [фаза])
DT	— dimer-tetramer [phase] (димер-тетрамерна [фаза])
LM	— Lieb-Mattis [phase] ([фаза] Ліба-Матіса)
PM	— paramagnetic [phase] (парамагнітна [фаза])
SC	— spin-canted [phase] ([фаза] скошених спінів)
OYA	— Oshikawa-Yamanaka-Affleck [rule] — ([правило] Ошікави-Яманаки-Афлека)

ВСТУП

Актуальність теми. У низьковимірних магнетиках зі спіном $1/2$ квантові ефекти відіграють вирішальну роль у їх поведінці при низьких температурах [1]. Основний стан одновимірних моделей зазвичай відповідає неупорядкованій фазі квантової спінової рідини, яка характеризується відсутністю локального порядку, степеневим загасанням кореляцій і безщілинним 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 [2].

Робота присвячена теоретичному опису квантових магнітних систем малої просторової вимірності, які мають складну структуру основного стану. Зокрема, ми зосередилися на дослідженні динамічних властивостей 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 [3, 4] та непружному розсіянню нейтронів [5, 6] 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 структурою, як, наприклад, спонтанне порушення просторової симетрії, дробові плато намагніченості та інше [2]. 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 [7].

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 № СВР.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 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 Гайзенберга та Ізинга.
4. Отримати точні розв’язки для ортогонально-димерних моделей у одному та двох вимірах.
5. Пертурбативно врахувати квантову XU частину міждимерних взаємодій для одно- та двовимірних ортогонально-димерних моделей та описати від-

повідні 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 ХУ 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 декораційно-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.

Структура та обсяг 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 сторінці (зі списком використаних джерел і додатками — 352 сторінки).

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 фрустрації 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.

У **другому розділі** отримано точні результати для динаміки спінів- $1/2$ XU ланцюжків та вивчено вплив симетричної та антисиметричної анізотропії на динамічний структурний фактор моделі. Для випадку ізотропного XX 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.

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

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. Для згаданого представлення 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 задання перетворення Йордана-Вігнера, які пов'язані калібрувальними перетвореннями.

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

Шостий розділ присвячений дослідженню спінів-1/2 ортогонально-димерних моделей в одному і двох вимірах. Спін-1/2 ортогонально-димерний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга розв'язано точно та здійснено теоретичний опис координаційного полімеру $[Dy_2Cu_2]_n$. Використовуючи унітарне перетворення, модель Ізинга-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда зведено до класичної моделі типу Ізинга та отримано ряд строгих результатів для фазової діаграми основного стану. Запропоновано теорію збурень за квантовою XU 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. Теорію збурень застосовано до теоретичного опису двовимірної магнітної сполуки $SrCu_2(VO_3)_2$ зі складною послідовністю дробових плато. Аналогічна теорія збурень дозволила здійснити теоретичний опис $Cu_3(P_2O_6OH)_2$, магнітоактивної сполуки зі структурою тримеризованого ланцюжка Гайзенберга.

У **сьомому розділі** розглянуто ряд одно- та двовимірних моделей на декорованих ґратках. Зокрема, вивчено квантовий октаедричний ланцюжок у випадку спінів 1/2 та варіант зі змішаними спінами 1 і 1/2. Слід відмітити, що останній випадок демонструє складну фазову діаграму з розмаїттям квантових фаз, серед яких особливо цікавою є кластеризована фаза Голдейна зі збільшеним періодом магнітної елементарної комірки внаслідок спонтанного порушення трансляційної симетрії. Це призводить у цій моделі до серії дробових плато 1/9, 1/6, 1/3, 2/3. Особливості температурної поведінки фрустрованих моделей проаналізовано на прикладі квантової спінів-1/2 моделі на квадратній ґратці декорованій ромбами. Для моделі Гайзенберга на такій ґратці встановлено лінії квантових фазових переходів першого роду між феримагнітною фазою Ліба-Матіса і мономер-димерною фазою, які закінчуються лінією критичних точок при скінченних температурах. У випадку модифікованої моделі Ізинга-Гайзенберга отримано строгі результати для ліній фазових переходів першого роду, яка закінчується лінією критичних точок Ізинга. Також в строгому підході вивчено термодинаміку спін-електронної моделі на подвійно-декорованій ґратці з Ізинґовими спінами на основних вузлах і делокалізованими електронами на парі декорованих вузлів та виявлено немоно-

тонну залежність температури переходу антиферромагнітного впорядкування від інтегралу переносу та Кулонового відштовхування електронів.

Завершено виклад дисертаційної роботи загальними висновками, в яких стисло підсумовано основні результати та можливості їх практичного застосування.

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 періодичних 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 XU 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 Ізинга-Гайзенберга 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 XU частини міждимерних взаємодій може бути використаний для досліджень великої кількості сполук з димерною структурою.

Результати отримані для полімерної координаційної сполуки $[Cu_2Dy_2]_n$ та квазідвовимірному магнітного матеріалу $SrCu_2(BO_3)_2$ пояснюють їх властивості в межах аналітичного підходу.

Особистий внесок здобувача. У роботах, виконаних спільно зі співавторами [8–38], здобувачу належить:

- обчислення xx динамічного структурного фактора [8, 9, 12];
- обчислення zz динамічного структурного фактора [10, 11];
- аналітичний розрахунок xx динамічних структурних факторів для регулярно і випадково неоднорідних XU ланцюжків [13, 14];

- постановка задачі про метод середнього поля для ферміонізованого гамільтоніану та розрахунки в такому наближенні [15–17];
- постановка задачі про точний розв’язок моделі Ізинґа-Гайзенберґа на двоногій драбинці та отримання точного розв’язку [18, 19];
- аналітичний розрахунок критичних поведінки магнетоелектрика Ізинґа-Гайзенберґа на двоногій драбинці [21];
- постановка задачі про точний розв’язок для ортогонально-димерної моделі Ізинґа-Гайзенберґа на одно- та двовимірних ґратках [22, 24];
- формулювання ефективної моделі для опису низькотемпературної термодинаміки ортогонально-димерного ланцюжка [23];
- формулювання теорії збурень для квантової XU частини міждимерної взаємодії для моделей з сильною взаємодією всередині димерів [25, 28, 29];
- розрахунки ефективної моделі Ізинґа для спін-електронної моделі з декорованими вузлами [30–32];
- аналіз фазової діаграми основного стану змішаного октаедричного ланцюжка [35];
- формулювання ефективних моделей для низькотемпературної термодинаміки ромбічного та октаедричного ланцюжків [33, 34, 36];
- отримання фазової діаграми для класичного варіанту моделі Гайзенберґа на квадратній ґратці декорованій ромбами [37];
- ефективний опис критичної поведінки моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці декорованій ромбами [37, 38].

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 результатів дисертації. 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); Різдвяні 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 [8–38], і 21 теза конференцій [39–59].

Подяки. Висловлюю щире подяку своєму науковому консультанту Олегу Держку за багаторічну підтримку і цінні поради при оформленні дисертації. Я

також вдячний усім співавторам своїх наукових праць, без яких ця робота не була б можливою.

Підтримка 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”, проєкту Національного фонду досліджень України № 2023.03/0063 “Фрустровані квантові магнетики за різних зовнішніх умов” сприяла якнайшвидшому завершенню роботи над моєю дисертацією.

РОЗДІЛ 1

ОГЛЯД ЛІТЕРАТУРИ

У цьому розділі проведено огляд робіт, присвячених дослідженню низьковимірних квантових моделей та відповідних магнітних кристалів, де буде звернуто увагу на властивості сильноскорельованих станів у таких системах. У першому підрозділі розглядаються моделі опису сильноскорельованих явищ у низьковимірних магнетиках. Другий підрозділ присвячено висвітленню магнетоактивних сполук, в яких яскраво проявляються комплексні квантові ефекти в низькотемпературній поведінці. У третьому підрозділі описано методи дослідження низьковимірних систем з сильними кореляціями і фрустраціями. Завершимо огляд переліком проблем опису явищ у згаданих матеріалах і моделях. Зауважимо також, що перелік фрустрованих моделей з різними типами взаємодій є надзвичайно великий (див., наприклад, [2, 60]). Не претендуючи на загальність, ми оглянемо тут моделі і явища дотичні до досліджень наведених у даній дисертаційній роботі.

До цього розділу ввійшли матеріали оглядів, поданих в статтях [8–38].

1.1. Низьковимірні моделі та сильноскорельовані квантові фази

Квантові спінові моделі локалізованих магнітних моментів, які описують магнетоактивні діелектрики, є найпростішим класом сильноскорельованих систем, що можуть демонструвати складну поведінку [1]. 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. Найвідомі-

міша з них — теорема Мерміна-Вагнера, яка доводить, що неперервна симетрія не може бути порушена в системах з короткосяжними взаємодіями розмірності $D \leq 2$ [61, 62] при відмінних від нуля температурах. Для одновимірних систем існує ще строгіше твердження, що короткосяжний ґратковий газ та його спіновий аналог, модель Ізинґа, також не зазнають фазових переходів [63]. Згодом цей результат було узагальнено на квантові системи [64], частковим випадком яких також можна вважати одновимірні квантові спінові моделі.

Як наслідок відсутнього порядку, в одновимірних квантових системах може реалізуватись в основному стані стан квантової спінової рідини (див. недавні огляди [65, 66]). Квантова спінова рідина — це сильноскорельований стан спінової системи, в якому, проте, відсутній будь-який локальний порядок. Він фактично відповідає системі в критичному стані, що проявляється в безщілинному спектрі елементарних збуджень та степеневому загасанні кореляцій. Відсутність локального порядку відбивається на елементарних збудженнях у такому стані, які вже не відповідають якомусь одному локальному оператору. Це сприяє появі дробових збуджень в цьому випадку. Особливо яскраво це помітно в динамічних властивостях неупорядкованих низьковимірних моделей, де резонансні моди змінюються протяжними профілями, які відповідають континууму елементарних збуджень. Саме тому особливий інтерес у дослідженні низьковимірних систем викликають динамічні величини. Їх вивчення, як правило, є набагато складнішою задачею в порівнянні з аналогічними дослідженнями статичних величин. Динамічні величини пов'язані з експериментальними спостереженнями, отриманими внаслідок магнітного розсіяння нейтронів і резонансного поглинання, які дають цінну інформацію про магнітну структуру матеріалів за умови, що є надійна теорія для їх інтерпретації. Таким чином, теоретичний аналіз динамічних величин для квантових спінових ланцюжків є важливим як з теоретичної/академічної, так і з експериментальної/практичної точок зору. Основною характеристикою магнітних систем спостережуваних експериментально є динамічний структурний фактор, який у

випадку одновимірних систем можна записати у такому вигляді:

$$S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega) = \sum_{m=1}^N \exp(-i\kappa m) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \left(\langle s_n^\alpha(t) s_{n+m}^\beta \rangle - \langle s_n^\alpha \rangle \langle s_{n+m}^\beta \rangle \right), \quad (1.1)$$

де $\langle (\dots) \rangle = \text{Tr}(\exp(-\beta H)(\dots)) / \text{Tr} \exp(-\beta H)$ позначає канонічне термодинамічне середнє і $s_n^\alpha(t) = \exp(iHt) s_n^\alpha \exp(-iHt)$ — Гайзенбергове представлення оператора s_n^α , а H — гамільтоніан системи. Згадані динамічні структурні фактори (1.1) можна відтворити з експериментальних даних непружного розсіяння нейтронів. Так, поперечний переріз непружного розсіяння в наближенні Борна пов'язаний з $S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)$ (1.1) таким чином [5, 6]:

$$\frac{d^2\sigma}{d\Omega dE} \propto \frac{k_f}{k_i} \sum_{\alpha,\beta} \left(\delta_{\alpha,\beta} - \frac{Q_\alpha Q_\beta}{Q^2} \right) S_{\alpha\beta}(\mathbf{Q}, \omega), \quad (1.2)$$

де \mathbf{k}_i (\mathbf{k}_f) позначає хвильовий вектор налітних (розсіяних) нейтронів, а $\mathbf{Q} = \mathbf{k}_f - \mathbf{k}_i$ — вектор розсіяння. Компоненти структурного фактора $S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)$ можуть бути визначені окремо з розсіяння поляризованих нейтронів [67].

Електронний спіновий резонанс (ESR) — ще одна експериментальна методика, яка дозволяє встановити динамічні характеристики магнітних матеріалів [3, 4]. В таких експериментах зразок піддається дії електромагнітних хвиль субміліметрового діапазону і вимірюється інтенсивність поглинання такого випромінювання. Зокрема, в конфігурації Фарадея статичне магнітне поле спрямоване вздовж напрямку поширення електромагнітної хвилі (виберемо вісь z без втрати загальності), а електромагнітна хвиля, поляризована в напрямку $\alpha \perp z$ відповідно, тоді експериментально вимірна інтенсивність поглинання визначається як [68]

$$I_{\alpha\alpha}(\omega) \propto \omega \frac{1 - \exp(-\beta\omega)}{2} S_{\alpha\alpha}(0, \omega). \quad (1.3)$$

Таким чином, теоретичні результати для динамічних структурних факторів прямо пов'язані з інтенсивністю поглинання ESR $I_{\alpha\alpha}(\omega)$.

Внаслідок сильних квантових флуктуацій властивості основного стану низьковимірних магнетиків можуть суттєво залежати від типів та конфігу-

рацій присутніх взаємодій. Насамперед, згадаємо антисиметричну взаємодію Дзялошинського-Морія [69, 70], яку виявлено в багатьох магнітних матеріалах [71–77]. Така надобмінна взаємодія $\mathbf{D}_{nm} \cdot [\mathbf{s}_n \times \mathbf{s}_m]$, яка зазвичай слабша за симетричну взаємодію Гайзенберга $J_{nm} (\mathbf{s}_n \cdot \mathbf{s}_m)$, виникає через спін-орбітальний зв'язок за умови відсутності центру інверсії у магнітному кристалі [70]. Цікаво, що використання взаємодії Дзялошинського-Морія не обмежується лише суто магнітними системами, а може використовуватись у мікроскопічному механізмі появи магнетоелектричного ефекту [78], а також при аналізі нерівноважних стаціонарних станів квантових спінових ланцюжків зі струмами [79, 80]. Крім того, взаємодія Дзялошинського-Морія може з'явитися при описі стохастичної кінетики процесів адсорбції-десорбції за допомогою представлення квантових спінів [81] (див. також [82]). У одновимірних системах найпомітніший ефект цієї взаємодії полягає у виникненні спіральних станів [83].

Низьковимірні квантові спінові моделі на фрустрованих ґратках, де конкуренція взаємодій спричинена їх топологією, представляють об'єкти інтенсивних досліджень (див., наприклад, огляди [60, 84–86]). Застосування аналітичних підходів до таких моделей досить складне, оскільки взаємовплив конкурентних взаємодій, квантових флуктуацій і магнітного поля зумовлює в основному стані, чи при досить низьких температурах різноманітність незвичайних квантових фаз. Спонтанна димеризація, локалізовані збудження, стрибки та плато намагніченості є найбільш типовими явищами, які можна спостерігати в геометрично фрустрованих квантових спінових моделях та відповідних магнітних кристалах [60, 84–88]. Одним з найпростіших прикладів одновимірної фрустрованої моделі є спін-1/2 $J_1 - J_2$ ланцюжок Гайзенберга, який демонструє квантовий фазовий перехід від безщілинної трансляційно-інваріантної фази квантової спінової рідини з алгебричним загасанням спінових кореляцій до спонтанно димеризованого стану [89] при $J_2 \approx 0,24J_1$ [90, 91], де J_1 — взаємодія найближчих, а J_2 — наступних після найближчих сусідів. У точці Маджумдара-Гоша [92], тобто при $J_2 = J_1/2$, основний стан є подвійно виродженим димерним добутком синглетних пар на сусідніх вузлах. Поблизу точки Маджумдара-Гоша існує перехід [93] до неспівмірної фази

для більших J_2 [90, 94]. Низькоенергетичні польові теорії [90, 95] не підходять для опису цього переходу, оскільки йому відповідає дуже коротка кореляційна довжина близько сталої ґратки. Також напівкласичні підходи [96, 97] не застосовні до цього переходу від співмірної до неспівмірної структури в $s = 1/2 J_1 - J_2$ ланцюжку, оскільки вони не в змозі відтворити, наприклад, солітонну природу фундаментальних збуджень [98].

Іншим прикладом фрустрованої моделі, з можливим синглет-димерним станом, є спін-1/2 модель Гайзенберґа на ромбічному ланцюжку. Коли сусідні спіни ромбічного ланцюжка з'єднані через антиферромагнітні взаємодії, ця модель фактично демонструє або феримагнітний впорядкований основний стан, або не-впорядковані димер-тетрамерну та мономер-димерну фази, залежно від величини геометричної фрустрації [99]. Також доступна низка точних результатів щодо властивостей при низьких температурах і досить сильних магнітних полях, близьких до значення насичення, при якому ця квантова система демонструє стрибок намагніченості до повністю поляризованої фази (див., наприклад, [86–88]). Точні результати також можна знайти для спеціального випадку ромбічного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа, коли єдиною квантовою взаємодією є вертикальні зв'язки Гайзенберґа між спінами. Тут можна застосувати декораційно-ітераційне перетворення для детального вивчення цієї спрощеної моделі в усьому діапазоні температур [100]. Ці результати узагальнено на випадок змішаного ромбічного ланцюжка з вищими спінами, для якого основні стани було знайдено строго [101]. Квантові фазові переходи і скінченно-температурні властивості ромбічного ланцюжка зі змішаними спінами 1 і 1/2 були вивчені в роботах [102, 103]. Фазову діаграму основного стану спін-1/2 моделі Гайзенберґа на дисторсному ромбічному ланцюжку не можна знайти точно в цілому, але було проведено широке дослідження основного стану за допомогою точної діагоналізації та деяких пертурбативних підходів [104, 105]. Вплив обмінної анізотропії на властивості основного стану спіну-1/2 XXZ ромбічного ланцюжка розглядався в роботах [106, 107], де було теоретично передбачено явище інверсії. У випадку анізотропії легкої площини фазова діаграма основного стану містить додаткову фазу Нееля як результат

комбінованого ефекту пов'язаного з обмінною анізотропією, геометричною фрустрацією та квантовими флуктуаціями.

Характерними особливостями поведінки фрустрованих систем у магнітному полі є поява дробових плато намагніченості. У одновимірних квантових ланцюжках Гайзенберга вони мають задовольняти умову квантування $p(S_u - m_u) \in \mathbb{Z}$ (p — період основного стану, S_u і m_u — загальний спін і загальна намагніченість на елементарну комірку, \mathbb{Z} — набір цілих чисел), яка була отримана Ошікавою, Яманакою, Афлеком (ОУА) шляхом розширення теореми Ліба-Шульца-Матіса [108–110]. Варто зауважити, що ОУА критерій забезпечує для заданого періоду основного стану p необхідну (але не достатню) умову наявності плато дробової намагніченості. Наскільки нам відомо, усі проміжні плато квантових ланцюжків Гайзенберга, які спостерігалися на сьогоднішній день експериментально, узгоджуються з ОУА правилом, якщо припустити або простий період $p = 1$, або просто подвоєння періоду $p = 2$. Наприклад, експериментальні представники ромбічного ланцюжка Гайзенберга зі спіном $1/2$ [111, 112], тримеризованого ланцюжка Гайзенберга [113, 114] і ланцюжка Гайзенберга зі змішаними спінами $(1/2, 1)$ [115] демонструють плато $1/3$, експериментальні реалізації тетрамеризованого спін- $1/2$ ланцюжка Гайзенберга [116], димеризованого ланцюжка Гайзенберга зі спіном $1/2$ [117] і зі спіном 1 [118] демонструють плато $1/2$, експериментальна реалізація спін- 1 драбинки Гайзенберга [119] показує плато $1/4$, тощо. З цієї точки зору досить цікаво, що спін- $1/2$ ортогонально-димерний ланцюжок Гайзенберга (або, еквівалентний йому, димер-плакетний ланцюжок) на перший погляд здається таким, що суперечить правилу ОУА, яке передбачає лише три його найбільш виражені дробові плато при $1/4$ і $1/2$ намагніченості насичення, коли період основного стану не перевищує подвоєння елементарної комірки (тобто $p = 2$). На противагу цьому, Шуленбург і Ріхтер стверджували на основі даних точної діагоналізації [120, 121], що дана модель демонструє між $1/4$ і $1/2$ нескінченний ряд менших дробових плато на $n/(2n + 2) = 1/4, 1/3, 3/8, \dots, 1/2$ намагніченості насичення. Узгодження цих результатів з правилом ОУА очевидне, якщо зауважити, що дана безмежна послідовність плато відповідає послідовності основних станів з відповідними пе-

ріодами ($n + 1$) елементарної комірки.

Квантова спін-1/2 модель Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда [122], яку традиційно називають моделлю Шастри-Сазерленда, є сучасним майданчиком для вивчення складної структури квантової матерії, що виникає у двовимірних магнітних системах. Таку модель ще можна собі уявити як двовимірний масив взаємно ортогональних спінових димерів [123]. Конкуренція між антиферомагнітними димерними J і міждимерними J' взаємодіями призводить до синглет-димерних і синглет-плакетних фаз з короткосяжними кореляціями в основному стані [122, 124]. Прикладання магнітного поля викликає кілька малих дробових плато намагніченості зі складним упорядкуванням локалізованих триплонних збуджень (див. огляд [125]). Теоретичне дослідження моделі Шастри-Сазерленда загалом являє собою складну проблему, яку намагалися вирішити багатьма числовими методами, такими як CORE [126], pCUTs [127–129], тензорною мережею iPEPS [130–132] та інші (див. огляд [123]). Крім того, тут можлива поява зв'язаних станів [130, 133–137], топологічних триплонних мод [138–140] та конденсації Бозе-Айнштайна [123, 141] — все це становить актуальний науковий інтерес. Нещодавно числовий варіаційний підхід пролив світло на квантові фази, що виникають на межі синглет-димерної фази [142].

Вивчення термодинамічних властивостей фрустрованих систем окреслює ще низку проблем, серед яких можна згадати температурні фазові переходи та кросовери, які сьогодні привертають значну увагу [143–145]. Димеризована природа низькоенергетичних станів у моделі Шастри-Сазерленда створює цікаву фізику також при ненульових температурах, де вона демонструє лінії фазових переходів першого роду між синглет-димерною та синглет-плакетною фазами, яка закінчується критичною точкою при скінченній температурі [146]. Інтерес до таких переходів походить від температурних досліджень фрустрованого двошару Гайзенберга, де було виявлено схожі немагнітні температурні переходи [147]. Зауважимо також, що низькоенергетична область високого поля повністю фрустрованої двошарової моделі допускає відображення на класичний ґратковий газ, таким чином дозволяючи в межах строгого підходу дослідження його низькоенергетичної

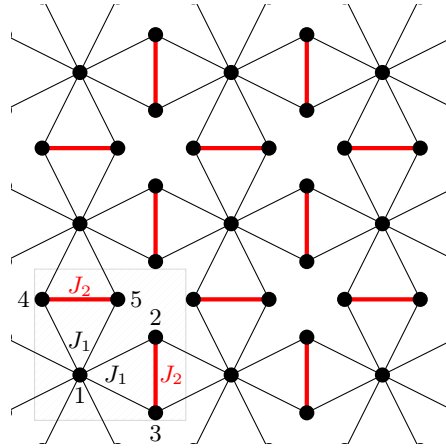


Рис. 1.1. Ілюстрація квадратної ґратки, декорованої ромбами, з позначеною елементарною коміркою (пунктирний квадрат), а також п'яти різних вузлів (круги) усередині елементарної комірки та двох різних обмінних взаємодій J_1 (тонкі чорні лінії) та J_2 (товсті червоні лінії).

термодинаміки, включаючи перехід упорядкування при скінченній температурі [86, 148, 149].

Ще одна сильно фрустрована двовимірна квантова спінова система взаємодіючих ортогональних спінових димерів — це антиферромагнетик Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами, показаний на рис. 1.1. На відміну від моделі Шастри-Сазерленда, вона містить, крім димерів (вздовж зв'язків J_2), додатковий набір спінів, які пов'язані з іншими (димерними) спінами лише зв'язками J_1 . У границі великих J_2 , для $J_1/J_2 \rightarrow 0$, ці спіни, пов'язані виключно через зв'язки J_1 , таким чином, не мають сусіднього спіна для утворення синглету, і тому назвемо їх мономерними спінами. Детальне дослідження властивостей основного стану за відсутності зовнішнього магнітного поля проведено в статтях [150–154]. Фазова діаграма у нульовому полі демонструє три різні основні стани, як показано на рис. 1.2, що передбачає цікаві фізичні ефекти також у скінченних полях і при скінченних температурах. У випадку сильної димерної взаємодії J_2 основний стан є прямим добутком синглетних станів на всіх димерах J_2 , тоді як решта спінів (які називають мономерними спінами) ефективно роз'єднані. Це призводить до великої ентропії основного стану $\ln(2)$ на елементарну комірку в цьому режимі ($J_2/J_1 > 2$), що позначається мономер-димерною (MD) фазою. З іншого боку, для слабких J_2 переважають триплетні стани на всіх димерах J_2 , тоді як

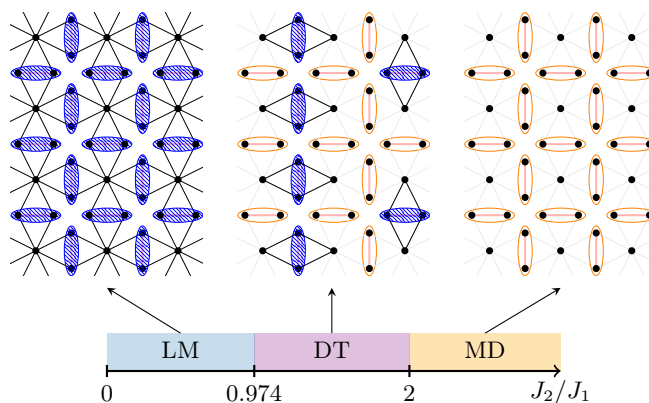


Рис. 1.2. Фазова діаграма основного стану спин-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованій ромбами, у нульовому магнітному полі, отримана з роботи [152], що містить фазу Ліба-Матіса (LM), димер-тетрамерну (DT) і мономер-димерну (MD) фази. На ілюстрації різних основних станів блакитні (помаранчеві) овали позначають спінові триплетні (синглетні) стани на димерах. Тетрамерний синглет DT-фази зображено ромбом.

спіни мономерів переважно орієнтовані протилежно до поляризації димерів. Це призводить до феримагнітного стану, схожого на феримагнітний основний стан моделі зі змішаним спіном 1 та 1/2 на ґратці Ліба [155]. Його феримагнітна поляризація впливає з теореми Ліба-Матіса [109] в термінах двох різних підґраток ґратки Ліба. Тому ця фаза також далі позначається LM. Ці дві фази MD і LM, розділені додатковою димер-тетрамерною (DT) фазою (див. рис. 1.2). У цій фазі утворюються два різних типи локальних синглетів: окрім синглетів J_2 -димерів, також виникають синглети на більших кластерах із чотирма спінами: а саме, серед тетрамерів, кожен з яких складається з одного димера та зв'язаних з ним його двох сусідніх мономерних спінів. DT фаза макроскопічно вироджена, а множина її основних станів складається з усіх конфігурацій щільно упакованих тетрамерів, решта J_2 -димерів утворюють димерні (двовузлові) синглети.

Слід зауважити, що поза нашою увагою залишилось чимало інших цікавих моделей, як, наприклад, фрустровані антиферромагнетики на ґратках кагоме, гіперкагоме, пірохлору (див. огляди [2]), а також модель Кітаєва на шестикутній ґратці [156], які викликають значний інтерес сучасних досліджень [157–159].

1.2. Сполуки

Неперервний прогрес у синтезі і дослідженні матеріалів дозволяє виявляти різноманітні класи магнітних кристалів [160]. Прояви континууму збуджень і його залежність від прикладеного поля було спостережено в магнітних сполуках Cs_2CuCl_4 [161], SrCuO_2 [162]. Надобмінна взаємодія у багатьох кристалах призводить до анізотропії у спіновій взаємодії, як, наприклад, $X\text{Y}$ анізотропія у сполуці Cs_2CoCl_4 [163], або взаємодія Дзялошинського-Морія у квазіодновимірних матеріалах $\text{K}_2\text{CuSO}_4\text{Cl}_2$ і $\text{K}_2\text{CuSO}_4\text{Br}_2$ [164, 165]. Також було виявлено, що спін-1/2 ланцюжок з фрустрованою взаємодією наступного після найближчих сусідів моделює квазіодновимірний матеріал CuGeO_3 [160, 166].

Експериментальне виявлення фрустрованого ромбічного ланцюжка в азуриті $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ [167], феримагнітного ромбічного ланцюжка в органічній системі [168], а також феромагнітних ромбічних ланцюжків у полімерних координаційних сполуках $\text{Bi}_4\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_{14}$ [169], $\text{Cu}_3(\text{TeO}_3)_2\text{Br}_2$ [170] і $\text{Cu}_3(\text{N}_3)_6(\text{DMF})_2$ [171] стимулювали ряд експериментальних [111, 172–175] і теоретичних [100, 176, 177] досліджень. Дослідження залежної від поля кривої намагніченості при низьких температурах демонструє появу дробового плато 1/3 намагнічення насичення в азуриті [167] та інших тримеризованих сполуках [113, 114, 178].

Найпоширеніше сімейство сполук з топологією двоногих драбинок утворюють купрати, в яких зустрічаються обидва експериментальні представники з домінантною взаємодією всередині щаблів як SrCu_2O_3 [179, 180], $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ [181–183], $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$ [184], $(5\text{IAP})_2\text{CuBr}_4$ [185], а також магнітні сполуки з домінантною ланцюжковою взаємодією, такі як KCuCl_3 [186, 187], TlCuCl_3 , NH_4CuCl_3 , KCuBr_3 [188]. Розуміння низькотемпературного магнетизму моделей двоногих драбинок також має вирішальне значення для пояснення механізму, який відповідає за високотемпературну надпровідність купратів [189]. Крім купратів, ще експериментальні представники драбинкових сполук представляють ванадати $(\text{VO})_2\text{P}_2\text{O}_7$ [185], CaV_2O_5 і MgV_2O_5 [190], а також полірадикал VIP-BNO [168, 191].

Найвідомішим експериментальним представником моделі Шастри-Сазерленда є шаруватий магнітний матеріал $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$. Перевідкрита Кагеямою *та ін.* [192], ця магнітна сполука надала довгоочікувану експериментальну реалізацію фази синглетних димерів при нульовому магнітному полі та кількох екзотичних квантових фазах, які проявляються на низькотемпературній кривій намагніченості у вигляді серії дробових плато намагніченості [131, 193, 194]. Більше того, співвідношення між внутрішньодимерними та міждимерними зв'язками в цій магнітній сполуці є досить близьким до межі фаз між синглет-димерною і синглет-плакетною фазами [124]. Виявляється, що за допомогою зовнішнього тиску можна налаштувати співвідношення між константами димерного та міждимерного зв'язку через деформацію кристала, і це дозволяє спостерігати за досить низьких температур фазовий перехід між синглет-димерною, синглет-плакетною і Неелевою фазами [195]. Фізичні прояви цих фаз у $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ перебувають у стадії інтенсивних експериментальних і теоретичних досліджень [196–200]. Тим не менш, навіть магнітна поведінка при низьких магнітних полях все ще не повністю зрозуміла. У роботі [193] дробові плато намагніченості на $1/8$, $2/15$, $1/6$, $1/4$ намагніченості насичення були виявлені за допомогою ядерного магнітного резонансу та вимірювань крутного моменту при $T = 60$ мК, тоді як вимірювання намагніченості в надсильних магнітних полях дали докази плато намагніченості $1/8$, $1/4$, $1/3$, $1/2$, зареєстрованих при $T = 2.4$ К [131]. Взаємодія Дзялошинського-Морія також важлива для правильного опису магнітних властивостей $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [138, 141, 201–203]. Зокрема, це призводить до нетривіальної топологічної зонної структури триплонів [138]. При скінченних температурах до 4 К в $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ ідентифіковано лінію фазових переходів першого роду індукованого прикладеним тиском, який закінчується критичною точкою, між синглет-димерною і синглет-тетрамерною фазами [146].

Цікаво, що $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ не єдиний приклад фізичної реалізації моделі Шастри-Сазерленда. Магнітна структура $(\text{CuCl})\text{Ca}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ також узгоджується з моделлю Шастри-Сазерленда, але феромагнітний характер міждимерного зв'язку, на жаль, запобігає виникненню дробових плато у відповідних низько-

температурних кривих намагніченості [204, 205]. З іншого боку, рідкоземельні тетрабориди RB_4 ($R = Dy, Er, Tm, Tb, Ho$) створюють інший клас магнітних матеріалів, які демонструють складну структуру дробових плато намагніченості, притаманних анізотропній моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда з сильною анізотропією типу Ізинґа [206–209]. У той час як антиферромагнітна модель Ізинґа на ґратці Шастри-Сазерленда здатна відтворити лише часткове $1/3$ -плато [210], можливий обмінний зв'язок між локалізованими спінами Ізинґа та спінами провідних електронів у металевих рідкісноземельних тетраборидах може бути істотним для опису їхніх магнітних властивостей [211].

Хоча нам наразі не відомо про будь-яку експериментальну реалізацію спін- $1/2$ ортогонально-димерного ланцюжка Гайзенберга, несподівано виявилось, що $3d-4f$ гетеробіметалічний координаційний полімер $\{[Dy(hfac)_2(CH_3OH)]_2[Cu(dmog)(Hdmog)]_2\}_n$ ($H_2dmog = \text{dimethylglyoxime}$; $Hhfac = 1,1,1,5,5,5\text{-hexafluoropentane-2,4-dione}$) [212], надалі скорочено $[Dy_2Cu_2]_n$, забезпечує експериментальну реалізацію ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберга. Насправді, полімерна сполука $[Dy_2Cu_2]_n$ демонструє своєрідну одновимірну архітектуру з регулярним чергуванням димерних одиниць $Dy^{3+}\text{-}Dy^{3+}$ і $Cu^{2+}\text{-}Cu^{2+}$ магнітних іонів, складених ортогонально один відносно одного, як показано на рис. 1.3 (а) [212]. Крім того, слід зазначити, що магнітний іон Dy^{3+} являє собою іон Крамерса з мультиплетом основного стану ${}^6H_{15/2}$, який зазнає впливу відносно сильного кристалічного поля, і розщеплюється на вісім добре розділених дублетів Крамерса [213, 214]. У зв'язку з цим магнітну поведінку магнітного іона Dy^{3+} із повним кутовим моментом $J = 15/2$ і пов'язаним з ним g -фактором $g_J = 4/3$ можна апроксимувати при достатньо низьких температурах за допомогою класичного спіна Ізинґа з ефективним гіромагнітним фактором $g_{Dy} = 20$, якщо нехтувати домішкою всіх збуджених дублетів Крамерса [213, 214]. Повертаючись до магнітної структури полімерного комплексу $[Dy_2Cu_2]_n$, яка схематично зображена на рис. 1.3 (b), вертикальний димер магнітних іонів $Dy^{3+}\text{-}Dy^{3+}$ можна апроксимувати парою Ізинґових спінів, тоді як горизонтальний димер магнітних іонів $Cu^{2+}\text{-}Cu^{2+}$ відповідає парі Гайзенберґових спінів.

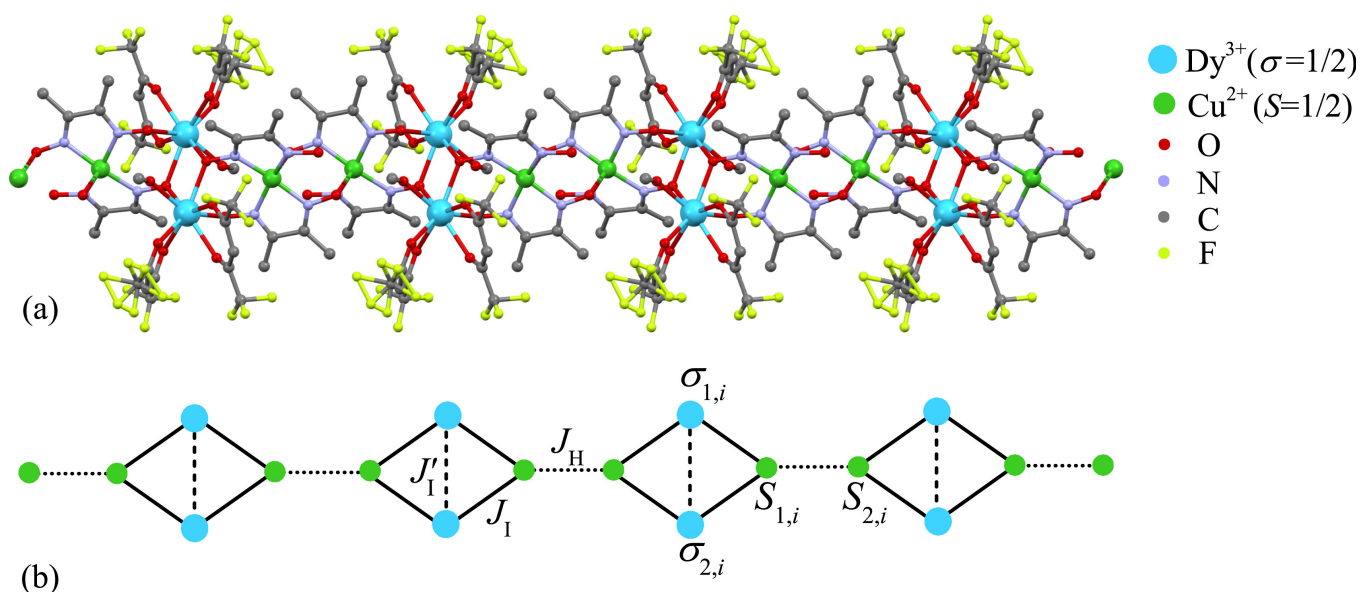


Рис. 1.3. (а) Кристалічна структура координаційного полімеру $3d-4f [Dy_2Cu_2]_n$ (повну хімічну формулу див. у тексті), адаптована відповідно до кристалографічних даних, наведених у поклику [212]. Великі блакитні кульки визначають кристалографічне положення магнітних іонів Dy^{3+} , тоді як маленькі зелені кульки позначають кристалографічне положення магнітних іонів Cu^{2+} (кольорова схема позначення атомів представлена в легенді). (б) Магнітна структура відповідного ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа, у якій магнітні іони Dy^{3+} розглядаються як спіни Ізинґа, тоді як магнітні іони Cu^{2+} розглядаються як спіни Гайзенберґа. Константи зв'язку J_I, J'_I і J_H приписуються міждимерній взаємодії Ізинґа між Dy^{3+iii} та Cu^{2+} (суцільні лінії), димерна взаємодія Ізинґа між магнітними іонами Dy^{3+} (штрихові лінії) та димерна взаємодія Гайзенберґа між Cu^{2+} магнітних іонів (пунктирні лінії) відповідно.

1.3. Методи

Існує цілий ряд аналітичних та числових методів, кожен з яких має свої переваги й недоліки у застосуванні до дослідження низьковимірних магнетиків. Насамперед слід згадати перетворення Йордана-Вігнера [215], яке встановлює зв'язок з ферміонним представленням квантових спінів-1/2 моделей. Ліб, Шульц і Матіс вперше використали це перетворення, щоб знайти точний розв'язок для анізотропного спінів-1/2 ХУ ланцюжка та ланцюжка Гайзенберґа-Ізинґа [108]. Згодом цю модель було розв'язано за наявності зовнішнього поля у z напрямку [216]. Узагальнення на випадок антисиметричної взаємодії Дзялошинського-Морія бу-

ло здійснено в роботах [83, 217–219]. Зокрема, у статті [219] було показано, що XU ланцюжок з всеможливими взаємодіями між x і y компонентами сусідніх спінів можна звести до анізотропного XU ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія:

$$H = \sum_n (J^x s_n^x s_{n+1}^x + J^y s_n^y s_{n+1}^y) + \sum_n D (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x) + \sum_n \Omega s_n^z. \quad (1.4)$$

Тут J^x , J^y — анізотропні константи обмінної XU взаємодії, D — z -компонента взаємодії Дзялошинського-Морія і Ω — поперечне магнітне поле. Перетворення Йордана-Вігнера

$$c_1 = s_1^-, \quad c_n = (-2s_1^z) (-2s_2^z) \dots (-2s_{n-1}^z) s_n^-, \quad n = 2, \dots, N, \quad (1.5)$$

перетворює спіновий гамільтоніан (1.4) в таку білінійну форму Фермі

$$H = \sum_n \left(\frac{J + iD}{2} c_n^+ c_{n+1} - \frac{J - iD}{2} c_n c_{n+1}^+ + \frac{\gamma}{2} (c_n^+ c_{n+1}^+ - c_n c_{n+1}) + \Omega \left(c_n^+ c_n - \frac{1}{2} \right) \right). \quad (1.6)$$

із $J = \frac{1}{2} (J^x + J^y)$, $\gamma = \frac{1}{2} (J^x - J^y)$.

Зазвичай покладають періодичні граничні умови для спінів $s_{N+1}^\alpha = s_1^\alpha$, тому білінійна форма Фермі (1.6) буде періодичною або антиперіодичною в залежності від непарного чи парного числа ферміонів. Після перетворення Фур'є

$$c_\kappa = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_n \exp(i\kappa n) c_n, \quad c_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_\kappa \exp(-i\kappa n) c_\kappa \quad (1.7)$$

(тут κ приймає N значень $\frac{2\pi}{N}n$ для періодичних граничних умов або $\frac{2\pi}{N}(n + \frac{1}{2})$ для антиперіодичних граничних умов; $n = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 1$ для парних N і $n = -\frac{N-1}{2}, -\frac{N-1}{2} + 1, \dots, \frac{N-1}{2}$ для непарних N) та перетворення Боголюбова до фермі-операторів β_κ

$$\beta_\kappa = iu_\kappa c_\kappa + v_\kappa c_{-\kappa}^+, \quad c_\kappa = -iu_\kappa \beta_\kappa + v_\kappa \beta_{-\kappa}^+ \quad (1.8)$$

із

$$u_\kappa = \text{sgn}(\gamma \sin \kappa) \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 + \frac{\Omega + J \cos \kappa}{\lambda_\kappa}}, \quad v_\kappa = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 - \frac{\Omega + J \cos \kappa}{\lambda_\kappa}},$$

$$\lambda_\kappa = \sqrt{(\Omega + J \cos \kappa)^2 + \gamma^2 \sin^2 \kappa} \quad (1.9)$$

гамільтоніан (1.6) набуває діагональної форми

$$H = \sum_{\kappa} \Lambda_{\kappa} \left(\beta_{\kappa}^+ \beta_{\kappa} - \frac{1}{2} \right), \quad (1.10)$$

$$\Lambda_{\kappa} = D \sin \kappa + \lambda_{\kappa}. \quad (1.11)$$

Тут слід зазначити, що лише енергетичний спектр Λ_{κ} (1.11) але не коефіцієнти перетворення Боголюбова u_{κ} , v_{κ} (1.9) залежать від D . Використовуючи (1.11), можна негайно знайти що спектр є безщілинним, коли $\gamma^2 \leq D^2$ і $\Omega^2 \leq J^2 + D^2 - \gamma^2$, або, коли $\gamma^2 > D^2$ і $\Omega^2 = J^2$. Таким чином, статистична сума, вільна енергія та й усі інші термодинамічні функції вільного ферміонного газу (і відповідного спінового ланцюжка) можуть бути легко знайдені.

Обчислення динамічних величин у методі ферміонізації Йордана-Вігнера є нетривіальною задачею, оскільки спінові оператори можуть виражатись через добутки багатьох фермі-операторів, не лишень на його, але й усіх попередніх вузлах (див. огляд [220]). Проілюструємо відомі результати на прикладі ізотропного ланцюжка (3.1) з $J^x = J^y = J$, $D = 0$. Насамперед зазначимо, що згідно симетрії $S_{zz}(\kappa, \omega)$ нечутливий до зміни знаку обмінної взаємодії $J \rightarrow -J$, тоді як для xx і yy структурних факторів справедливе співвідношення $S_{xx}(\kappa, \omega) \rightarrow S_{xx}(\kappa \mp \pi, \omega)$, $S_{xy}(\kappa, \omega) \rightarrow S_{xy}(\kappa \mp \pi, \omega)$. З робіт [221–224] відомо, що ферміонне зображення zz структурного фактора можна просто обчислити

$$S_{zz}(\kappa, \omega) = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 n_{\kappa_1} (1 - n_{\kappa+\kappa_1}) \delta(\omega + \Lambda_{\kappa_1} - \Lambda_{\kappa+\kappa_1}), \quad (1.12)$$

де $\Lambda_{\kappa} = \Omega + J \cos \kappa$ — енергія елементарних збуджень ферміонів Йордана-Вігнера. Очевидно, що zz динамічний структурний фактор (1.12) формується континуумом двоферміонних (частинково-діркових) збуджень [222–224]. Для нього можна ввести такі характерні лінії в площині κ - ω :

$$\frac{\omega^{(1)}(\kappa)}{|J|} = 2 \left| \sin \frac{\kappa}{2} \sin \left(\frac{|\kappa|}{2} - \alpha \right) \right|,$$

$$\begin{aligned}\frac{\omega^{(2)}(\kappa)}{|J|} &= 2 \left| \sin \frac{\kappa}{2} \sin \left(\frac{|\kappa|}{2} + \alpha \right) \right|, \\ \frac{\omega^{(3)}(\kappa)}{|J|} &= 2 \left| \sin \frac{\kappa}{2} \right|,\end{aligned}\tag{1.13}$$

де $\alpha = \arccos(|\Omega|/|J|)$ змінюється від $\pi/2$ (коли $\Omega = 0$) до 0 (коли $|\Omega| = |J|$). $S_{zz}(\kappa, \omega)$ в основному стані відмінний від нуля для $|\Omega| < |J|$ і в обмеженій області площини κ - ω (припускаємо $|\kappa| \leq \pi$, $\omega \geq 0$) з нижньою межею $\omega_l(\kappa) = \omega^{(1)}(\kappa)$ і верхньою межею $\omega_u(\kappa) = \omega^{(2)}(\kappa)$, якщо $0 \leq |\kappa| \leq \pi - 2\alpha$, або $\omega_u(\kappa) = \omega^{(3)}(\kappa)$, якщо $\pi - 2\alpha \leq |\kappa| \leq \pi$. Крім того, $S_{zz}(\kappa, \omega)$ демонструє скінченний стрибок уздовж середньої межі $\omega_m(\kappa) = \omega^{(2)}(\kappa)$, $\pi - 2\alpha \leq |\kappa| \leq \pi$. Нарешті, $S_{zz}(\kappa, \omega)$ показує сингулярність ван Гова вздовж кривої $\omega_s(\kappa) = \omega^{(3)}(\kappa)$. З підвищенням температури нижня межа розмивається і остаточно зникає. Верхня межа задається $\omega^{(3)}(\kappa)$ і $S_{zz}(\kappa, \omega)$ стає незалежним від поля у високотемпературній границі.

Динамічний структурний фактор xx/xy визначається багатоферміонними збудженнями і тому є набагато складнішою величиною (двоферміонний внесок у $S_{xx}(\kappa, \omega)$ обговорювався в статтях [225, 226]). Проте основний стан $S_{xx}(\kappa, \omega)$ і $S_{xy}(\kappa, \omega)$ можна легко обчислити для сильних полів $|\Omega| > |J|$ [227]:

$$S_{xx}(\kappa, \omega) = i \operatorname{sgn}(\Omega) S_{xy}(\kappa, \omega) = \frac{\pi}{2} \delta(\omega - |\Omega| - J \cos \kappa).\tag{1.14}$$

Рівняння (1.14) показує, що вся спектральна вага в цьому випадку зосереджена вздовж кривої

$$\frac{\omega^*(\kappa)}{|J|} = \frac{|\Omega|}{|J|} + \operatorname{sgn}(J) \cos \kappa.\tag{1.15}$$

При достатньо низьких температурах ($k_B T/|J| = 0.01 \dots 0.05$) з результатів числових методів відомо (див. посилання [228]), що хоча $S_{xx}(\kappa, \omega)$ і $S_{xy}(\kappa, \omega)$ *априорі* не обмежені певною областю в площині κ - ω (і насправді ці величини мають ненульові значення по всій площині κ - ω), незважаючи на це, їх значення досить малі за межами двоферміонного континууму збуджень, розглянутого вище. Точніше, xx і xy динамічні структурні фактори показують розмиті гілки збуджень, приблизно дотримуючись границь двоферміонного континууму збуджень (див. рівняння

(1.13)) для $J < 0$ або за цими межами, зміщеними вздовж осі κ на π для $J > 0$. У високотемпературній границі отримуємо [229–232]

$$\begin{aligned} S_{xx}(\kappa, \omega) &= \frac{\sqrt{\pi}}{4|J|} \left(\exp\left(-\frac{(\omega - \Omega)^2}{J^2}\right) + \exp\left(-\frac{(\omega + \Omega)^2}{J^2}\right) \right), \\ iS_{xy}(\kappa, \omega) &= \frac{\sqrt{\pi}}{4|J|} \left(\exp\left(-\frac{(\omega - \Omega)^2}{J^2}\right) - \exp\left(-\frac{(\omega + \Omega)^2}{J^2}\right) \right), \end{aligned} \quad (1.16)$$

тобто xx і xy динамічні структурні фактори в цьому випадку незалежні від κ і демонструють гаусовий профіль при $\omega = \pm\Omega$.

Подібні результати щодо динамічних властивостей димеризованого спін-1/2 XX ланцюжка (тобто з $J_n = J(1 - (-1)^n\delta)$, де $0 < \delta < 1$ — параметр димеризації, і $D_n = 0$ у рівнянні (3.1)) можна знайти в статті [233] (і покликах приведених там).

Перетворення Йордана-Вігнера допускає зображення неvvзаємодіючих безспінових ферміонів лишень у випадку XU взаємодій між найближчими сусідніми вузлами, як це розглянуто вище, або у випадку специфічних багатоспінових взаємодій [234]. Очевидно, що zz взаємодія, чи взаємодія між дальніми сусідами призводить до появи у ферміонізованому гамільтоніані чотириферміонних або складніших доданків. У випадку ланцюжка Гайзенберга Булаєвський запропонував застосувати до моделі взаємодіючих ферміонів наближення Гартрі-Фока, де виділялись елементарні спарення на одному чи сусідніх вузлах [235]. Такий підхід був також використаний для дослідження XXZ ланцюжка у поздовжньому і поперечному полях [226, 236, 237]. Крім того, наближення типу Гартрі-Фока застосовувались і до моделей зі складнішою конфігурацією взаємодій, як двонога драбинка [238], $J_1 - J_2$ ланцюжок [239, 240].

Метод сильного зв'язку [241], який базується на теорії збурень для багатьох частинок [242], представляє ще один потужний метод для дослідження фрустрованих систем. Він дозволяє отримати простіші ефективні гамільтоніани для низькоенергетичних збуджень, які вже не містять фрустрацій, і або допускають точні розв'язки, або такі моделі можна успішно розглянути числовими методами. В межах багаточастинкової теорії збурень повний гамільтоніан H розбивається

на ідеальну (точно-розв'язну) $H^{(0)}$ і збурену $H^{(1)}$ частини:

$$H = H^{(0)} + \lambda H^{(1)}, \quad (1.17)$$

де вважаємо, що власні значення для ідеальної частини $H^{(0)}|\Phi_i\rangle = E_i^{(0)}|\Phi_i\rangle$ відомі. Якщо P є оператором проекції на підпростір основних станів $|\Phi_0\rangle$ ідеальної частини $H^{(0)}$ і $Q = 1 - P$, розклад теорії збурень можна формально отримати для ефективного гамільтоніана, що діє в підпросторі спроектованому на P :

$$H_{eff} = PHP + \lambda^2 PH^{(1)}R_s \sum_{n=0}^{\infty} \left((QH^{(1)} - \delta E_0)R_s \right)^n QH^{(1)}P, \\ R_s = Q \frac{1}{E_0^{(0)} - H^{(0)}} = \sum_{m \neq 0} \frac{|\Phi_m\rangle\langle\Phi_m|}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}} = \sum_{m \neq 0} \frac{Q_m}{E_0^{(0)} - E_m^{(0)}}, \quad (1.18)$$

де $\delta E_0 = E_0 - E_0^{(0)}$. Пертурбативне розвинення (1.18) все ще є точним, але його зазвичай доводиться обривати через обчислювальні труднощі, що виникають через внески вищого порядку $H_{eff}^{(n)}$ ефективних гамільтоніанів. У цій роботі ми обмежимося пертурбативним розкладом другого порядку, який враховуватиме внески нульового, першого та другого порядку в ефективний гамільтоніан: $H_{eff}^{(0)} = PH^{(0)}P$, $H_{eff}^{(1)} = \lambda PH^{(1)}P$ і $H_{eff}^{(2)} = \lambda^2 PH^{(1)}R_s H^{(1)}P$ відповідно.

У даній роботі ми використовували ряд числових методів у випадках, коли точні результати були недосяжні, або для того, щоб оцінити справедливість використаних наближених підходів. Недавні огляди числових методів можна знайти у [243, 244]. Найуніверсальнішим підходом для фрустрованих моделей можна вважати точну діагоналізацію (див. огляд [245]), в межах якої можна розрахувати власні енергії і стани різноманітних систем скінченного розміру. Розмір таких систем може бути порядку 50 вузлів, проте сильно залежать від величини спінів і наявних симетрій у моделі. Це обмеження часто є вирішальним у випадку, якщо потрібно оцінити ефекти скінченного розміру. На противагу цьому метод ренормгрупи для матриці густини (DMRG) [246, 247], який є варіаційним підходом розробленим для одновимірних систем, дозволяє отримати прецизійні результати для основних і низькоенергетичних збуджених станів достатньо довгих систем

розміром кілька сотень вузлів. Згодом його було розширено на клас квантових станів, які можна зобразити матричними добутками, та узагальнено на випадок безмежних одновимірних систем [248].

Для вивчення термодинамічних властивостей квантових моделей у просторовій вимірності $D > 1$ квантовий метод Монте-Карло є високоефективним, оскільки допускає розгляд систем достатньо великого розміру. Серед різних формулювань цього методу, стохастичий розклад в ряд для квантового методу Монте-Карло (SSE QMC) [249–251] пропонує високоефективний та об'єктивний підхід до вивчення квантових спінових моделей. На жаль, під час його формулювання в традиційному локальному базисі спіну S^z введення геометричної фрустрації загалом призводить до проблеми знаків, тобто експоненційного падіння статистичної точності моделювання QMC при низьких температурах і великих розмірах системи [252–254]. Проте, у певних випадках цю проблему можна усунути, якщо виконувати моделювання QMC на відмінному базисі від локального спіну S^z . Точніше, натомість розглядаються відповідні базисні стани після розкладу гамільтоніана на окремі члени кластерів із кількома вузлами, таких як димери чи тримери [255–257]. Випадок димерів може бути використаний для повного усунення проблеми знаку, наприклад, для повністю фрустрованої моделі двошару [147, 256, 258], тоді як локальний базис спінового тримера дозволяє уникнути проблеми знака для повністю фрустрованої моделі тришару [257] у спін-1/2 антиферомагнетику. Такий підхід було спеціально адаптовано до моделі Шастри-Сазерленда в димерному базисі, щоб уникнути проблеми зі знаком у моделюванні QMC цієї фрустрованої квантової спінової системи [259].

1.4. Проблеми

Складність опису низьковимірних фрустрованих систем та розмаїття явищ, які виявляються у них, становить цілий ряд задач для їх задовільного опису. Зокрема вплив взаємодії Дзялошинського-Морія, яка часто присутня в низькорозмірних магнітних діелектриках, залишається не вивченим. Хоча величина цієї

взаємодії зазвичай невелика, її наявність може викликати помітні зміни в різних спостережуваних характеристиках магнітних систем (див., наприклад, [71, 260]). З теоретичної точки зору, хоча спін-1/2 XU ланцюжок може бути відображено на одновимірну модель невзаємодіючих безспінових ферміонів, аналіз динамічних характеристик спінової моделі зовсім не тривіальний. zz спінова кореляційна функція відповідає кореляційній функції густина-густина для безспінових ферміонів і її обчислення можна здійснити в межах аналітичного підходу [221, 224]. На противагу цьому, інші (xx, yy, xy, yx) спінові кореляційні функції є більш складними величинами через нелокальний характер співвідношення Йордана-Вігнера між операторами s^+ та s^- і операторами наародження та знищення ферміонів. Явні аналітичні результати для них знайдено при високих температурах [229–232] і в основному стані для сильних полів [227]. З робіт [261–265] також відома асимптотика деяких залежних від часу спінових кореляційних функцій в окремих граничних випадках. З іншого боку, залежні від часу спінові кореляційні функції (і відповідні динамічні структурні фактори та динамічна сприйнятливість) можна розрахувати чисельно [228, 233, 266–268]. Попередні дослідження впливу взаємодії Дзялошинського-Морія були обмежені поперечними (zz) динамічними властивостями [218, 269], а також динамікою кореляцій між x і y компонентами спіну при безмежній температурі [270]. Зокрема, поперечну динамічну сприйнятливість $\chi_{zz}(\kappa, \omega)$ було знайдено при $\kappa = 0$ [218] і $\kappa \neq 0$ [269]. Зв'язок між XU ланцюжками без та з взаємодією Дзялошинського-Морія на підставі симетрії обговорювався в роботі [271]. Крім того, наскільки нам відомо, вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на xx, yy, xy, yx динамічні структурні фактори при скінченних температурах раніше не вивчався. Тут зазначимо, що динамічні властивості більш загальної моделі, спін-1/2 антиферромагнітного XXX ланцюжка Гайзенберга, із взаємодією Дзялошинського-Морія були досліджені в статтях [272, 273]. Таким чином, в роботі [272] показано за допомогою аргументів симетрії, що хоча взаємодія Дзялошинського-Морія тривіально змінює спектр моделі, вплив на спінові кореляції та динамічну сприйнятливість залишається суттєвим. У роботі [273], спінові кореляційні функції та динамічні сприйнятливості ланцюжка

із взаємодією Дзялошинського-Морія виражено через такі ж величини звичайного XXZ ланцюжка. Проте, результати для останнього моделі були обмежені хвильовими векторами, близькими до краю зони Брилюена, малими енергіями і низькими температурами.

Пошук задовільних аналітичних підходів для опису фрустрованих моделей теж залишається актуальною задачею. Перетворення Йордана-Вігнера є ще однією технікою, що допускає аналітичне наближення для низьковимірних квантових спінових систем (див., наприклад, огляд [274]). Його також було застосовано до $J_1 - J_2$ ланцюжка [239, 240], однак лише для обмеженого набору конфігурацій середнього поля. Хоча в роботі [240] повідомлено про неспівмірну фазу для більших J_2 , ця робота не розглядала димеризовані стани і таким чином не в змозі відтворити щілину в спектрі, яка, як відомо, є суттєвою в цій області (див., наприклад, [90]). Це мотивувало нас провести систематичне дослідження спін-1/2 $J_1 - J_2$ ланцюжка з використанням перетворення Йордана-Вігнера та врахування всіх можливих конфігурацій середнього поля. Зауважимо, що ефекти анізотропії у спін-1/2 $J_1 - J_2$ ланцюжку були вивчені систематично або числовими методами [93, 275], або використовуючи теоретико-польовий підхід [89, 276, 277], але не за допомогою підходів, які базуються на застосуванні перетворення Йордана-Вігнера [239, 240]. Попередні теоретичні підходи для квантових спінових ромбічних ланцюжків теж базуються здебільшого на числових методах, а ферміонізацію Йордана-Вігнера було застосовано в роботах [278–280]. Однак, представлені там результати не враховують фазові множники, тому їх не можна вважати надійними.

Існування строгих результатів є дуже важливим у вивченні фрустрованих моделей, оскільки вони забезпечують точну інформацію про їх складну поведінку. На жаль, точні результати для таких систем все ще обмежені (див. огляд [281]). Найпростіші приклади точно розв'язних квантових спінових моделей — це моделі з відомим димеризованим [281–284] або навіть тримеризованим [285] основними станами. Інший приклад представляє собою фрустровані антиферромагнетики у сильних магнітних полях з власними станами локалізованих магнонів (див., наприклад, огляд [86]). З іншого боку, точні розв'язки для деяких спін-1/2 квантових

спінових драбинок з багатоспіною взаємодією дозволяють знайти, крім основного стану, також термодинамічні властивості [286, 287]. Точно розв'язні моделі, які допускають включення фрустрації, також можна побудувати з моделей Ізинга, де включено декорації квантових спінів [100, 288]. Декораційно-ітераційна процедура дозволяє обчислити строго всі термодинамічні властивості декорованих моделей, якщо відомий точний розв'язок для відповідної моделі Ізинга. Відмінна риса цих моделей полягає в тому, що квантові декорації відокремлені одна від одної, так що гамільтоніан можна розкласти на суму коммунуючих частин. Тоді власні стани повного гамільтоніана просто розкладаються на множники у добуток власних станів його коммунуючих частин. Слід, однак, зауважити, що вищезазначені точні результати зазвичай отримують лише за певних обмежень накладених на параметри взаємодії, а ці моделі не піддаються досить загальному розгляду.

Особливо цікавими можуть бути результати, які стосуються появи і розмірів дробових плато намагніченості у фрустрованих спінових моделях [125]. У одновимірних моделях можлива поява дробових плато задовольняє умові ОУА [110], як згадувалось у підрозділі 1.1. У випадку, коли в основному стані фрустрованих моделей порушується просторова симетрія і його період може бути як завгодно великим в залежності від магнітного поля, в системі може виникати безмежна послідовність дробових плато намагніченості, як це виявлено в ортогонально-димерному ланцюжку [120]. Ситуація стає складнішою у двовимірних системах, де немає схожого критерію. Найвідоміший приклад є модель Шастри-Сазерленда [122], двовимірний варіант ортогонально-димерної моделі, який відповідає магнітній структурі $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [289]. Початкові вимірювання намагніченості у високому полі для $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ дали переконливі докази наявності трьох значних плато на $1/8$, $1/4$ і $1/3$ повної намагніченості на додаток до очікуваного плато при нульовій намагніченості, що відповідає синглет-димерному стану [192]. Подальші вимірювання обертального моменту [194], показали наявність кількох додаткових плато, окрім трьох найбільших плато згадані раніше. Експерименти у постійному полі, підтверджені результатами ядерного магнітного резонансу [193], встановили, що послідовність плато низької намагніченості становить $1/8$, $2/15$, $1/6$ і

1/4. У надсильних магнітних полях для $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ було встановлено наявність надійного плато намагніченості на 1/2 намагніченості насичення [194, 290], ширина якого становить майже половину від зареєстрованої для найбільшого плато 1/3 [131]. Багато зусиль було спрямовано на вивчення процесу намагнічення моделі Шастри-Сазерленда, щоб знайти розумне пояснення квантових основних станів, які макроскопічно проявляються як проміжні плато намагніченості [123, 126, 127, 130, 135, 193, 291]. Ефективна модель жорстких бозонів, отримана пертурбативно з границі невзаємодіючих ортогональних димерів [123], а також різних варіацій неперервних унітарних перетворень [127, 128] добре працює для відносно малого співвідношення між димерною і міждимерною взаємодією. З іншого боку, числові підходи придатні лише для малих розмірів доступних систем [126, 131]. Тому незважаючи на значні зусилля, загальна кількість, розмір та мікроскопічна природа деяких проміжних плато намагніченості остаточно не були з'ясовані.

З експериментальної точки зору, останні вимірювання питомої теплоємності сполуки Шастри-Сазерленда $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [122, 123] в нульовому магнітному полі свідчать про чітку лінію фазових переходів першого роду на фазовій діаграмі у змінних тиску і температури [146]. Експериментально спостережувану лінію переходів першого роду, що закінчується в критичній точці класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа, було ідентифіковано як лінію співіснування димер-синглетної та плакет-синглетної фаз. І справді, недавнє теоретичне моделювання такої моделі задовільно відтворило виміряні дані питомої теплоємності [146]. Крім того, виявилось, що фрустрований магнітний матеріал $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ виявляє в скінченних магнітних полях різноманітні квантові та температурні фазові переходи на фазовій діаграмі тиск-температура-поле, природа яких не до кінця зрозуміла [143, 146, 292–295]. Варто зауважити, що такі раніше невідомі фазові переходи можна зустріти в інших низьковимірних фрустрованих квантових матеріалах (див. недавній огляд [296]). Лінії таких немагнітних фазових переходів першого роду, що закінчуються в критичних точках Ізинґа, нещодавно були також виявлені для спін-1/2 двошару [147, 297] та тришару [257] Гайзенберґа на

квадратній ґратці.

РОЗДІЛ 2

ДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ СПІН-1/2 ХУ ЛАНЦЮЖКІВ З ВЗАЄМОДІЄЮ ДЗЯЛОШИНСЬКОГО-МОРІЯ

У цьому розділі отримано строгі результати для динамічних властивостей квантових спінових ланцюжків з взаємодією Дзялошинського-Морія. Тут ми використовуємо метод ферміонізації Йордана-Вігнера, який доповнюється подальшими аналітичними та числовими розрахунками, щоб провести комплексний аналіз впливу взаємодії Дзялошинського-Морія на динамічні структурні фактори спін-1/2 ХУ ланцюжків у поперечному полі. Спочатку розглянуто спін-1/2 ізотропний ХУ ланцюжок в (z) поперечному магнітному полі із взаємодією Дзялошинського-Морія спрямованої вздовж осі z у спіновому просторі і вивчено вплив цієї взаємодії на динамічні структурні фактори zz , xx (yy) і xy (yx). В той час як взаємодія Дзялошинського-Морія не проявляється у zz динамічних величинах, xx (yy) і xy (yx) динамічні структурні фактори показують різкі зміни внаслідок взаємодії Дзялошинського-Морія. Також проаналізовано вплив цієї взаємодії на результати ESR експериментів.

В другій частині розділу розглянуто анізотропний варіант спін-1/2 ХУ ланцюжка із взаємодією Дзялошинського-Морія у поперечному полі та вивчено вплив вищезгаданої взаємодії на zz , xx і yy динамічні структурні фактори. Оскільки zz динамічний структурний фактор визначається двоферміонним континуумом збуджень, проаналізовано одночасний вплив на нього взаємодії Дзялошинського-Морія та ХУ анізотропії. Інші динамічні структурні фактори, які керуються багатферміонними збудженнями розраховуються числовим методом. На завершення

обговорюється як взаємодія Дзялошинського-Морія проявляється в динамічних властивостях квантових спінових ланцюжків при різних полях і температурах.

Основні результати цього розділу викладені у роботах [8–12, 39, 40].

2.1. Симетрії ізотропного XU ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія

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

$$H = \sum_{n=1}^N J (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + \sum_{n=1}^N D (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x) - \sum_{n=1}^N h s_n^z, \quad (2.1)$$

де s^α — половини матриць Паулі, J — XX обмінна взаємодія, D — взаємодія Дзялошинського-Морія, і h — поперечне магнітне поле. У моделі (2.1) 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 $N \rightarrow \infty$. Спінова модель (2.1) має низку симетрій, що дозволяє скоротити діапазон параметрів і спростити дослідження її динамічних властивостей. Після виконання $\pi/2$ -обертання всіх спінів навколо z -осі приходимо до висновку, що $S_{xx}(\kappa, \omega) = S_{yy}(\kappa, \omega)$ і $S_{xy}(\kappa, \omega) = -S_{yx}(\kappa, \omega)$ і таким чином, єдині динамічні структурні фактори, які залишилися вивчити є $S_{zz}(\kappa, \omega)$, $S_{xx}(\kappa, \omega)$ і $S_{xy}(\kappa, \omega)$. Слід зазначити, що після перетворення $\tilde{s}_n^x = s_n^x$, $\tilde{s}_n^y = -s_n^y$, $\tilde{s}_n^z = -s_n^z$, приходимо до моделі (2.1) з параметрами J , $-D$, $-h$ і в результаті, можна отримати такі співвідношення між динамічними структурними факторами моделей з різними параметрами: $S_{\alpha\alpha}(\kappa, \omega)|_{D,h} = S_{\alpha\alpha}(\kappa, \omega)|_{-D,-h}$, $\alpha = x, y, z$ але $S_{xy}(\kappa, \omega)|_{D,h} = -S_{xy}(\kappa, \omega)|_{-D,-h}$. Подібне перетворення $\tilde{s}_n^x = (-1)^n s_n^x$, $\tilde{s}_n^y = (-1)^n s_n^y$, $\tilde{s}_n^z = s_n^z$, змінює знаки у модельних параметрах таким чином $-J$, $-D$, h ; ця симетрія означає, що $S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)|_{-J,-D} = S_{\alpha\beta}(\kappa \pm \pi, \omega)|_{J,D}$, $\alpha, \beta = x, y$, $S_{zz}(\kappa, \omega)|_{-J,-D} = S_{zz}(\kappa, \omega)|_{J,D}$. Нарешті, просторове відбиття визначене як $j \rightarrow N - j + 1$, $j = 1, \dots, N$, призводить до зміни знаку D у гамільтоніані (2.1), і отже $S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)|_D = S_{\alpha\beta}(-\kappa, \omega)|_{-D}$, $\alpha, \beta = x, y, z$.

У нашому дослідженні важливу роль відіграє калібрувальне перетворення, що усуває взаємодію Дзялошинського-Морія з гамільтоніана (2.1) за рахунок перенормованої обмінної взаємодії XX (див., наприклад, [71, 260, 271–273, 298, 299]). Явно, це неоднорідне перетворення повороту спінів записуємо у такому вигляді

$$\begin{aligned} \tilde{s}_n^x &= s_n^x \cos \phi_n + s_n^y \sin \phi_n, & \tilde{s}_n^y &= -s_n^x \sin \phi_n + s_n^y \cos \phi_n, & \tilde{s}_n^z &= s_n^z, \\ \phi_n &= (n-1)\varphi, & \tan \varphi &= \frac{D}{J}. \end{aligned} \quad (2.2)$$

За допомогою перетворення (2.2) знаходимо новий гамільтоніан (2.1)

$$H = \sum_{n=1}^N \tilde{J} (\tilde{s}_n^x \tilde{s}_{n+1}^x + \tilde{s}_n^y \tilde{s}_{n+1}^y) - \sum_{n=1}^N \tilde{s}_n^z, \quad \tilde{J} = \text{sgn}(J) \sqrt{J^2 + D^2}. \quad (2.3)$$

Останній вираз відповідає моделі без взаємодії Дзялошинського-Морія, проте, з перенормованою XX взаємодією \tilde{J} . Надалі, ми використовуємо відомі результати для моделі (2.3), щоб розрахувати динамічні властивості моделі з взаємодією Дзялошинського-Морія (2.1), застосовуючи перетворення поворотів (2.2). В принципі, жодних нових розрахунків (порівняно з даними в [228, 233]) не потрібно. Крім того, в підрозділі 2.2 використовуються результати для $S_{xy}(\kappa, \omega)$ отримані в статтях [228, 233]. З цього обговорення очевидно, що взаємодія Дзялошинського-Морія не може бути виявлена з вимірювань термодинамічних величин оскільки ці величини не можуть розрізнити моделі (2.1) і (2.3) пов'язаних унітарним перетворенням (2.2). Проте, як продемонстровано нижче, взаємодію Дзялошинського-Морія можна визначити за деякими динамічними величинами.

2.2. Вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на динамічні структурні фактори

Оскільки неоднорідні спінові повороти (2.2) не зачіпають z компоненти спінів, відповідний структурний фактор якісно не зміниться і відповідатиме тій самій величині для гамільтоніану з перенормованою взаємодією. В результаті можна легко отримати вирази для zz динамічного структурного фактора спінового

ланцюжка (2.1)

$$S_{zz}(\kappa, \omega) = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 n_{\kappa_1} (1 - n_{\kappa_1 + \kappa}) \delta(\omega + \Lambda_{\kappa_1} - \Lambda_{\kappa_1 + \kappa}),$$

$$\Lambda_{\kappa} = -h + \tilde{J} \cos \kappa, \quad n_{\kappa} = \frac{1}{1 + \exp(\beta \Lambda_{\kappa})}, \quad (2.4)$$

який визначається континуумом двоферміонних (частинково-діркових) збуджень (див. рівняння (1.12) та статтю [224]).

Властивості двоферміонного континууму збудження були детально вивчені в роботах [222, 224]. Ці результати знадобляться в подальшому, і тому наведемо їх тут для зручності. Отож, введемо наступні характерні лінії континуумом двоферміонних збуджень (1.13) в площині κ - ω , які потрібно скоригувати для випадку перенормованої взаємодії:

$$\frac{\omega^{(1)}(\kappa)}{\sqrt{J^2 + D^2}} = 2 \left| \sin \frac{\kappa}{2} \sin \left(\frac{|\kappa|}{2} - \alpha \right) \right|, \quad (2.5)$$

$$\frac{\omega^{(2)}(\kappa)}{\sqrt{J^2 + D^2}} = 2 \left| \sin \frac{\kappa}{2} \sin \left(\frac{|\kappa|}{2} + \alpha \right) \right|, \quad (2.6)$$

$$\frac{\omega^{(3)}(\kappa)}{\sqrt{J^2 + D^2}} = 2 \left| \sin \frac{\kappa}{2} \right|, \quad (2.7)$$

де параметри $\alpha = \arccos(|h|/\sqrt{J^2 + D^2})$ змінюються від $\pi/2$, коли $h = 0$, до 0, коли $|h| = \sqrt{J^2 + D^2}$. В такому випадку очевидно, що взаємодія Дзялошинського-Морія проявляється в поперечній динаміці тривіальним чином, і таким способом її не можна виявити в системі. Тому далі переходимо до інших динамічних структурних факторів. Використовуючи перетворення (2.2), знаходимо співвідношення між xx і xy динамічними структурними факторами моделі (2.1) (ліва сторона рівнянь (2.8), (2.9)) і xx і xy динамічними структурними факторами моделі (2.3) (права сторона рівнянь (2.8), (2.9))

$$S_{xx}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2} (S_{xx}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} + S_{xx}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} + i(S_{xy}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} - S_{xy}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}})), \quad (2.8)$$

$$S_{xy}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2} (S_{xy}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{j}} + S_{xy}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{j}})$$

$$-i(S_{xx}(\kappa - \varphi, \omega)|_{\tilde{J}} - S_{xx}(\kappa + \varphi, \omega)|_{\tilde{J}}). \quad (2.9)$$

Надалі можна використовувати рівняння (2.8) і (2.9) і давно відомі результати для динаміки моделі (2.3), щоб дослідити вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на xx і xy динаміку. У випадку безмежної температури $\beta = 0$ [229–232] залежні від часу спінові кореляції xx і xy на різних вузлах обертаються в нуль і лише автокореляції виживають, $\langle s_n^x(t)s_{n+m}^x \rangle|_{\tilde{J}} = (1/4) \cos(ht) \exp(-\tilde{J}^2 t^2/4) \delta_{m,0}$, $\langle s_n^x(t)s_{n+m}^y \rangle|_{\tilde{J}} = (1/4) \sin(ht) \exp(-\tilde{J}^2 t^2/4) \delta_{m,0}$. У такому разі (тобто коли виживають лише автокореляції) згідно (2.2) маємо $\langle s_n^x(t)s_{n+m}^x \rangle|_{J,D} = \langle s_n^x(t)s_{n+m}^x \rangle|_{\tilde{J}}$ і $\langle s_n^x(t)s_{n+m}^y \rangle|_{J,D} = \langle s_n^x(t)s_{n+m}^y \rangle|_{\tilde{J}}$. Цей результат для моделі (2.1), який впливає з симетрійних міркувань, також було отримано раніше прямим обчисленням [270] (див. рівняння (4.8) цієї статті)). Оскільки xx і xy динамічні структурні фактори не залежать від κ взаємодія Дзялошинського-Морія відповідно до рівнянь (2.8), (2.9) перемасштабовує залежність від енергії цих динамічних структурних факторів у високотемпературній границі $\beta = 0$:

$$S_{xx}(\kappa, \omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{4\tilde{J}} \left(\exp\left(-\frac{(\omega + h)^2}{\tilde{J}^2}\right) + \exp\left(-\frac{(\omega - h)^2}{\tilde{J}^2}\right) \right) \quad (2.10)$$

$$iS_{xy}(\kappa, \omega) = \frac{\sqrt{\pi}}{4\tilde{J}} \left(\exp\left(-\frac{(\omega + h)^2}{\tilde{J}^2}\right) - \exp\left(-\frac{(\omega - h)^2}{\tilde{J}^2}\right) \right). \quad (2.11)$$

Таким чином, у високотемпературній границі $\beta = 0$ динамічні структурні фактори xx і xy κ -незалежні і демонструють одинарний пік Гауса при $\omega = |h|$.

У випадку скінченних температур $0 < \beta < \infty$ аналітичні вирази для динамічних структурних факторів $S_{xx}(\kappa, \omega)|_{\tilde{J}}$ і $S_{xy}(\kappa, \omega)|_{\tilde{J}}$ моделі (2.3) не відомі, але їх можна знайти числовим методом для ланцюжків із кількома сотнями вузлів. Дотримуючись процедури [228, 233, 266, 267], проводимо числові розрахунки для ланцюжка з $N = 400$ вузлів. Розглянемо антиферромагнітний знак обмінної взаємодії XX і зафіксуємо енергетичні одиниці поклавши $J = 1$. Наші результати стосуються низької температури $\beta = 20$ і термодинамічної границі.

На рис. 2.1 і 2.2 показано $S_{xx}(\kappa, \omega)$ і $iS_{xy}(\kappa, \omega)$, відповідно. Наведені дані стосуються репрезентативних наборів параметрів гамільтоніана $D = 0, 1$,

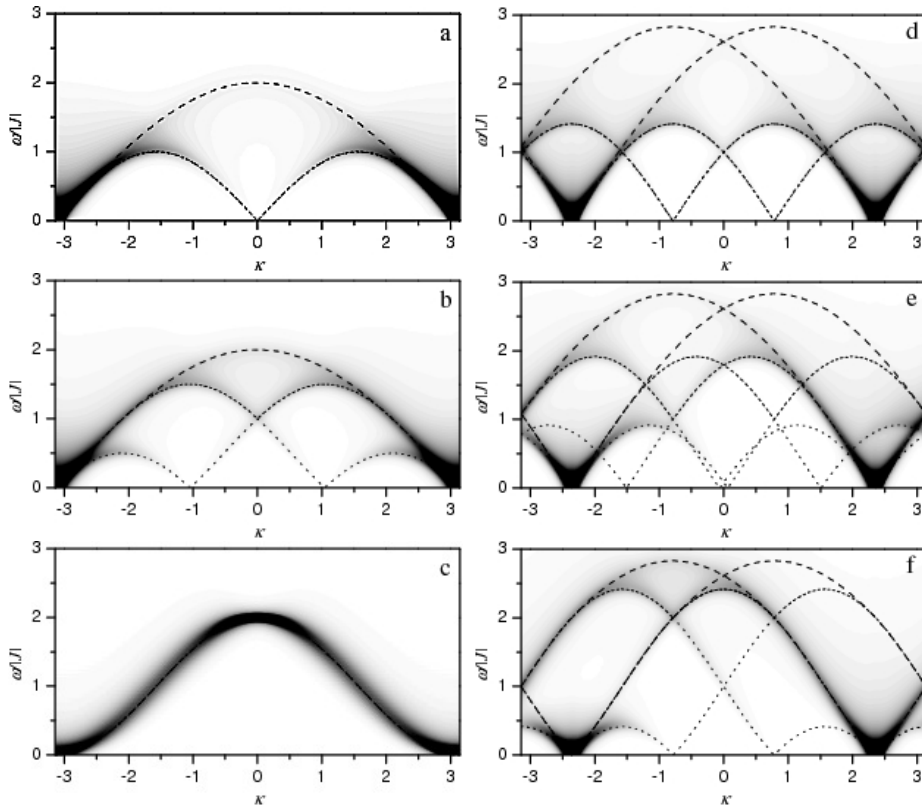


Рис. 2.1. $S_{xx}(\kappa, \omega)$ для ланцюжка (2.1) з $J = 1$, $D = 0$ (рисунки зліва a, b, c) і $D = 1$ (рисунки справа d, e, f), $h = 0.001$ (a, d), $h = 0.5$ (b, e), $h = 1$ (c, f) при низьких температурах $\beta = 20$. Також наведено межі $\omega^{(1)}(\kappa' \pm \varphi)$ (2.5), $\omega^{(2)}(\kappa' \pm \varphi)$ (2.6) (крапкові та короткоштрихові криві) та $\omega^{(3)}(\kappa' \pm \varphi)$ (2.7) (штрихові криві).

$h = 0.001, 0.5, 1$. Як добре видно на рис. 2.1 і 2.2, xx і xy динамічні структурні фактори зосереджені переважно вздовж певних ліній в площині κ - ω , які пов'язані з характерними лініями двоферміонного континууму збуджень (2.5), (2.6), (2.7). Нагадаємо, що у випадку $D = 0$ і $J < 0$ xx і xy динамічні структурні фактори зосереджені приблизно вздовж границь двоферміонного континууму збуджень $\omega_l(\kappa)$, $\omega_m(\kappa)$, $\omega_u(\kappa)$ [228, 233]. У випадку $D = 0$ і $J > 0$ (див. ліві панелі на рис. 2.1 і 2.2) відношення симетрії, згадане вище, передбачає, що ці динамічні структурні фактори повинні бути зосереджені приблизно вздовж ліній $\omega_l(\kappa') = \omega_l(\kappa \pm \pi)$, $\omega_m(\kappa') = \omega_m(\kappa \pm \pi)$, $\omega_u(\kappa') = \omega_u(\kappa \pm \pi)$, як це добре помітно на лівих панелях рис. 2.1 і 2.2. За наявності взаємодії Дзялошинського-Морія $D \neq 0$ ця проста відповідність порушується, і стає все більш заплутаною, а саме двоферміонний континуум збудження розпадається на два континууми, “лівий” (з межами $\omega_l(\kappa' - \varphi)$, $\omega_m(\kappa' - \varphi)$, $\omega_u(\kappa' - \varphi)$) і “правий” (з межами $\omega_l(\kappa' + \varphi)$, $\omega_m(\kappa' + \varphi)$, $\omega_u(\kappa' + \varphi)$);

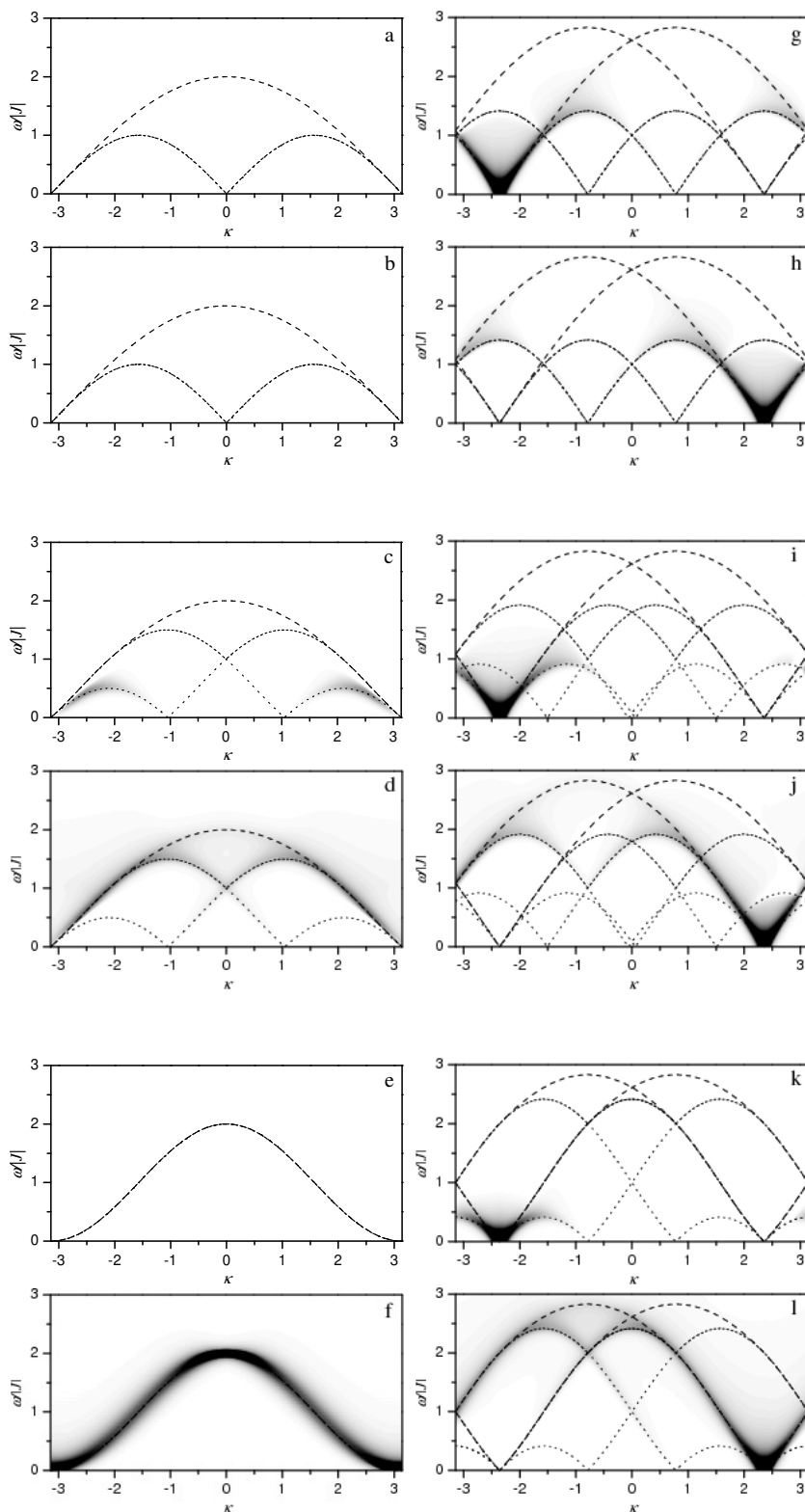


Рис. 2.2. Додатня (а, г, с, і, е, к) та від'ємна (b, h, d, j, f, l) частини $iS_{xy}(\kappa, \omega)$ для ланцюжка (2.1) з $J = 1$, $D = 0$ (ліві панелі а, b, с, d, е, f) і $D = 1$ (праві панелі g, h, і, j, k, l), $h = 0.001$ (а, b, g, h), $h = 0.5$ (с, d, і, j), $h = 1$ (е, f, k, l) при низьких температурах $\beta = 20$. $S_{xy}(\kappa, \omega) = 0$ при $D = 0$, $h = 0$ (див. панелі а та b) та $iS_{xy}(\kappa, \omega)$ стають цілком від'ємними у границі сильних полів (див. панелі е, f). Також наведено межі $\omega^{(1)}(\kappa' \pm \varphi)$ (2.5), $\omega^{(2)}(\kappa' \pm \varphi)$ (2.6) (пунктирні та коротко-штрихові криві) та $\omega^{(3)}(\kappa' \pm \varphi)$ (2.7) (штрихові криві).

ці континууми поєднані операціями симетрії, поясненими вище. Чим більше D , тим більше розщеплення, яке визначається значенням φ . При фіксованому $D \neq 0$ і $h = 0$ спектральна вага рівномірно розподілена між лівим і правим континуумами, що призводить до симетрії відносно $\kappa \rightarrow -\kappa$ (рис. 2.1(d) і 2.2(g), 2.2(h)). Асиметрія відносно $\kappa \rightarrow -\kappa$ виникає, коли поле h відхиляється від нуля. Тоді як $|h|$ збільшується від 0 до $\sqrt{J^2 + D^2}$ спектральна вага “переміщується” з лівого континууму в правий і вся спектральна вага стає зосередженою вздовж границь правого континууму, коли $|h|$ наближається до $\sqrt{J^2 + D^2}$ (рис. 2.1f і 2.2k, 2.2l). Наявність взаємодії Дзялошинського-Морія викликає ряд специфічних змін, які добре видно на правих панелях рис. 2.1, 2.2. Наприклад, незалежні від поля моди на $\pm\pi$ зсуваються до $\pm\pi \mp \varphi$. Також можна побачити помітні зміни в профілях частоти для фіксованого значення хвильового вектора (скажімо, $\kappa = 0$ або $\kappa = \pm\pi$).

Розглянемо також випадок нульової температури $\beta \rightarrow \infty$, для якого відомий точний результат для сильних полів, $|h| > \sqrt{J^2 + D^2}$ [227]. Оскільки основний стан повністю поляризований (тобто повністю порожній/заповнений на мові ферміонів) залежні від часу спінові кореляційні функції $\langle s_n^x(t) s_{n+m}^x \rangle |_{\tilde{J}}$ і $\langle s_n^x(t) s_{n+m}^y \rangle |_{\tilde{J}}$ можна легко обчислити [227]. Це дає такі результати для динамічних структурних факторів (1.1) моделі (2.1)

$$S_{xx}(\kappa, \omega) = -\text{sgn}(h) i S_{xy}(\kappa, \omega) = \frac{\pi}{2} \delta \left(\omega - |h| - \tilde{J} \cos(\kappa + \text{sgn}(h)\varphi) \right). \quad (2.12)$$

Відповідно до формули (2.12) $\text{sgn}(i S_{xy}(\kappa, \omega)) = -\text{sgn}(h)$ і $i S_{xy}(\kappa, \omega) < 0$ для позитивних h (насправді для $h > \sqrt{J^2 + D^2}$) (див. низькотемпературні дані на рис. 2.2(e), (f)). Далі, всю спектральну вагу для обох динамічних величин зосереджено вздовж кривої

$$\frac{\omega^*(\kappa)}{\sqrt{J^2 + D^2}} = \frac{|h|}{\sqrt{J^2 + D^2}} + \text{sgn}(J) \cos(\kappa + \text{sgn}(h)\varphi). \quad (2.13)$$

При $|h| \rightarrow \sqrt{J^2 + D^2}$ права сторона рівняння (2.13) перетворюється або в $2 \cos^2((\kappa + \text{sgn}(h)\varphi)/2)$, якщо $J > 0$ (порівняйте з даними про низьких температурах показаних на рис. 2.1(c) і 2.2(f)), або в $2 \sin^2((\kappa + \text{sgn}(h)\varphi)/2)$, якщо

$J < 0$.

Розрахувавши (частково аналітично і частково числовим методом) xx і xu динамічні структурні фактори моделі (2.1), можна зробити висновок, що ці динамічні величини при скінченних температурах виявляють ряд особливостей, а саме, асиметрію відносно $\kappa \rightarrow -\kappa$ при $h \neq 0$, специфічну структуру частотних профілів при фіксованих значеннях κ , незалежні від поля положення м'яких мод, які можна використовувати для однозначного визначення взаємодії Дзялошинського-Морія.

2.3. Спектр електронного спінового резонансу при наявності взаємодії Дзялошинського-Морія

Результати для динамічних структурних факторів можуть бути використані для обговорення впливу взаємодії Дзялошинського-Морія на поглинання енергії в ESR експериментах. Зауважимо, що аналогічний аналіз ESR спектрів у спін-1/2 XX ланцюжку було зроблено в роботі [300]. Очевидно, що його можна поширити на випадок наявності у моделі взаємодії Дзялошинського-Морія.

Розгляньмо ESR експеримент у стандартній конфігурації Фарадея, в якому статичне магнітне поле, спрямоване вздовж осі z 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 вимірюються інтенсивність поглинання випромінювання $I(\omega)$ як функцію статичного магнітного поля при різних частотах $\omega > 0$ електромагнітної хвилі, яка у рамках теорії лінійного відгуку має вигляд (1.3), 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. 2.3 показано типову залежність інтенсивності поглинання $I(\omega)$ при фіксованій частоті ω у прикладеному статичному магнітному полі h , отриману числовим методом для ланцюжка $N = 400$ вузлів. Результати стосуються низьких (гра-

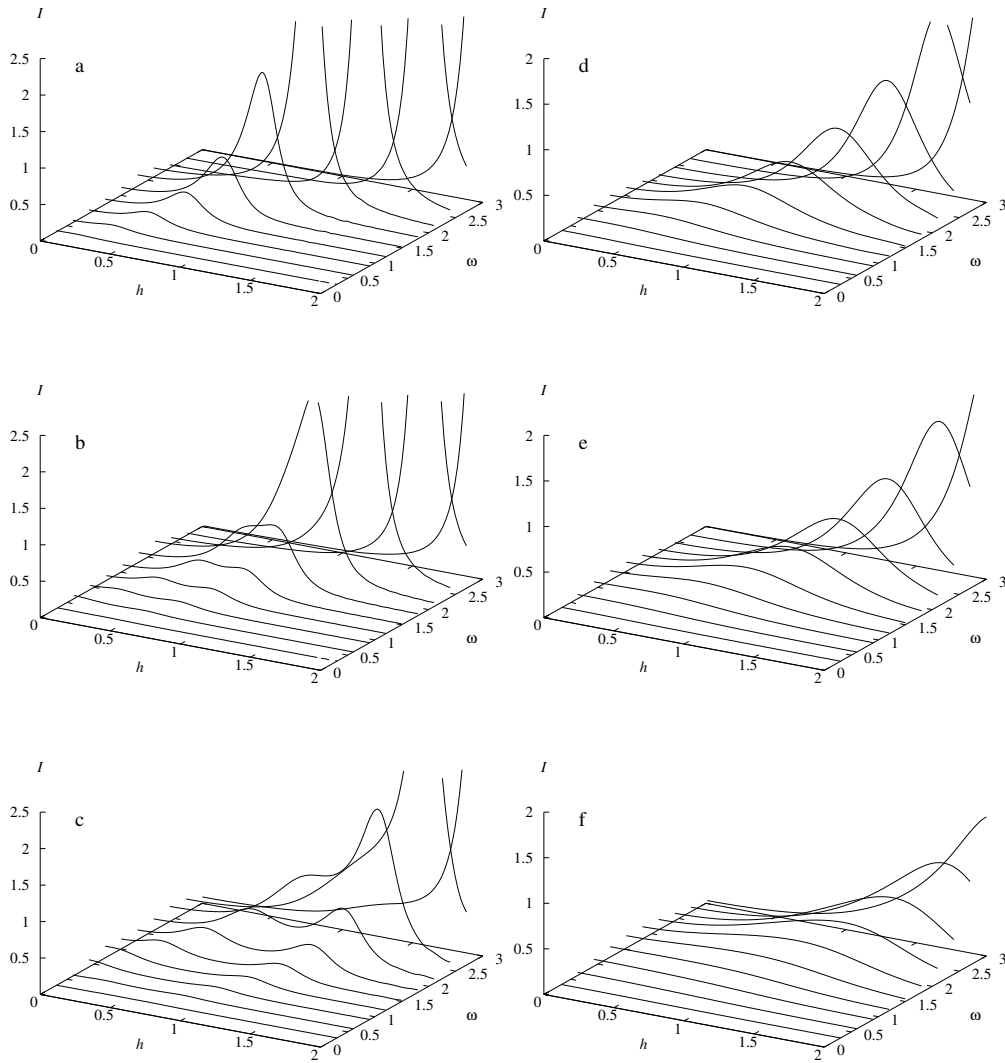


Рис. 2.3. Низькотемпературна (ліві панелі a, b, c) і проміжна температура (праві панелі d, e, f) інтенсивність поглинання $I(\omega)$ на різних частотах ω і магнітних полях h для спін-1/2 XX ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія. $J = 1$, $D = 0$ (a, d), $D = 0.5$ (b, e), $D = 1$ (c, f), $\beta = 5$ (ліві панелі a, b, c), $\beta = 1$ (праві панелі d, e, f).

фіки ліворуч) і проміжних (праворуч) температур. Вони демонструють зміни в поглинанні зі зростанням D (згори до низу).

З'ясуємо вплив взаємодії Дзялошинського-Морія на інтенсивність поглинання ESR для спін-1/2 XX антиферромагнітного ланцюжка. У **границі сильного поля** $h > \sqrt{J^2 + D^2}$, коли всі міжспінові взаємодії можна розглядати як збурення. При нульовій температурі згідно (1.3), (2.12) маємо $I(\omega) \propto (\pi/4)\omega\delta(\omega - h - J)$. Таким чином, для $h > \sqrt{J^2 + D^2}$ і $\beta \rightarrow \infty$ резонансна лінія є абсолютно різкою і розташована точно в $h + J$. Примітно, взаємодія Дзялошинського-Морія випадає

з інтенсивності поглинання! Поведінку інтенсивності поглинання в межі сильного поля для низьких і проміжних температур можна прослідкувати з лівих та правих панелей на рис. 2.3 відповідно. Для границі безмежної температури $\beta = 0$ отримуємо (для довільних полів) $I(\omega) \propto (1/2) (\beta\omega^2 + \mathcal{O}(\beta^2)) S_{xx}(0, \omega)$ з $S_{xx}(0, \omega)$, визначене рівнянням (2.10) і, отже, I демонструє гаусовий пік при $\omega = h$.

Проста картина, справедлива у границі сильного поля, руйнується нижче поля насичення $0 < h < \sqrt{J^2 + D^2}$. У цьому випадку важливими стають міжспінові взаємодії і ми бачимо більш складну поведінку на рис. 2.3). Зокрема, при наявності взаємодії Дзялошинського-Морія польова залежність інтенсивності поглинання при низьких температурах в певному діапазоні частот може мати двопікову структуру (порівняйте рис. 2.3(a), 2.3(b), 2.3(c)). Це, очевидно, пов'язано з розглянутим вище розщепленням двоферміонного континууму збудження, за характерними лініями якого переважно зосереджений xx динамічний структурний фактор.

2.4. Динамічні кореляції анізотропного XY ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія і континуум двоферміонних збуджень

У цьому підрозділі розглядається анізотропна версія XY ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія, яка задається гамільтоніаном (1.4). Деякі з її динамічних властивостей досліджено раніше [218, 269, 270]. Зокрема, поперечну динамічну сприйнятливість $\chi_{zz}(\kappa, \omega)$ моделі (1.4) було отримано явно для $\kappa = 0$ [217] і $\kappa \neq 0$ [269].

Для аналітичного розрахунку zz динамічного структурного фактора моделі (1.4) можна розглядати тільки періодичні (або тільки антиперіодичні) граничні умови для білінійної форми Фермі (1.6). Використавши співвідношення між спінами та операторами Фермі (1.5) і перетворення (1.7) і (1.8), (1.9), після стандартних

розрахунків за допомогою теореми Віка-Блоха-де Домінісіса ми приходимо до

$$\begin{aligned}
S_{zz}(\kappa, \omega) = & \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 \left((u_{\kappa_1}^2 u_{\kappa_1-\kappa}^2 - u_{\kappa_1} u_{\kappa_1-\kappa} v_{\kappa_1} v_{\kappa_1-\kappa}) n_{\kappa_1} (1 - n_{\kappa_1-\kappa}) \delta(\omega + \Lambda_{\kappa_1} - \Lambda_{\kappa_1-\kappa}) \right. \\
& + (u_{\kappa_1}^2 v_{\kappa_1-\kappa}^2 + u_{\kappa_1} u_{\kappa_1-\kappa} v_{\kappa_1} v_{\kappa_1-\kappa}) n_{\kappa_1} n_{-\kappa_1+\kappa} \delta(\omega + \Lambda_{\kappa_1} + \Lambda_{-\kappa_1+\kappa}) \\
& + (u_{\kappa_1-\kappa}^2 v_{\kappa_1}^2 + u_{\kappa_1} u_{\kappa_1-\kappa} v_{\kappa_1} v_{\kappa_1-\kappa}) (1 - n_{-\kappa_1}) (1 - n_{\kappa_1-\kappa}) \delta(\omega - \Lambda_{-\kappa_1} - \Lambda_{\kappa_1-\kappa}) \\
& \left. + (v_{\kappa_1}^2 v_{\kappa_1-\kappa}^2 - u_{\kappa_1} u_{\kappa_1-\kappa} v_{\kappa_1} v_{\kappa_1-\kappa}) (1 - n_{-\kappa_1}) n_{-\kappa_1+\kappa} \delta(\omega - \Lambda_{-\kappa_1} + \Lambda_{-\kappa_1+\kappa}) \right), \quad (2.14)
\end{aligned}$$

де $n_{\kappa} = (\exp(\beta\Lambda_{\kappa}) + 1)^{-1}$ — функція Фермі-Дірака. Цей результат узгоджується з відповідною формулою для поперечної динамічної сприйнятливості $\chi_{zz}(\kappa, \omega)$, отриманою у роботі [269].

Запровадивши функцію

$$f(\kappa_1, \kappa) = \frac{(\Omega + J \cos(\kappa_1 - \frac{\kappa}{2})) (\Omega + J \cos(\kappa_1 + \frac{\kappa}{2})) - \gamma^2 \sin(\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}) \sin(\kappa_1 + \frac{\kappa}{2})}{\lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} \lambda_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}}, \quad (2.15)$$

динамічний структурний фактор $S_{zz}(\kappa, \omega)$ (2.14) можна записати у компактній формі

$$\begin{aligned}
S_{zz}(\kappa, \omega) = & \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 \left(\frac{1 + f(\kappa_1, \kappa)}{2} (1 - n_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}) n_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}} \delta(\omega - \Lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} + \Lambda_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}) \right. \\
& + \frac{1 - f(\kappa_1, \kappa)}{4} \left((1 - n_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}) (1 - n_{-\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}) \delta(\omega - \Lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} - \Lambda_{-\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}) \right. \\
& \left. \left. + n_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}} n_{-\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}} \delta(\omega + \Lambda_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}} + \Lambda_{-\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}) \right) \right). \quad (2.16)
\end{aligned}$$

У границі ізотропної ХУ взаємодії $\gamma = 0$ рівняння (2.16) дає результат, отриманий раніше [8, 9, 12]. У границі $D = 0$ (коли $\Lambda_{\kappa} = \lambda_{\kappa} = \lambda_{-\kappa} \geq 0$) і $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) рівняння (2.16) набуває простої форми

$$S_{zz}(\kappa, \omega) = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 \frac{1 - f(\kappa_1, \kappa)}{4} \delta(\omega - \Lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} - \Lambda_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}). \quad (2.17)$$

Це збігається з виразом, отриманим раніше в роботі [224]. Легко помітити, що рівняння (2.17) є загальнішим для випадку $\gamma^2 > D^2$ (коли $\Lambda_{\kappa} > 0$) і $T = 0$. У випадку $D^2 > \gamma^2$ і $T = 0$ або в найзагальнішому випадку довільного D і $T > 0$

(а також у випадку $D = 0$, але $T > 0$, який не розглядався в роботі [224]) zz динамічний структурний фактор виявляє нові якісні властивості у порівнянні з аналізом, наведеним у роботі [224]. Знову zz динамічний структурний фактор регулюється виключно двоферміонними збудженнями як видно з рівняння (2.16), однак, для $D^2 > \gamma^2$, $T = 0$ або для $T > 0$ вклади усіх трьох δ -функцій в рівнянні (2.16) стають суттєвими.

На рис. 2.4 показано градієнтне зображення для $S_{zz}(\kappa, \omega)$ при низькій температурі ($\beta J = 50$) для кількох типових наборів параметрів ($J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 0, 0.5, 1$, $\Omega = 0, 0.5, 1$, $\frac{\sqrt{7}}{2}$). Для $\gamma^2 > D^2$ (праві панелі рис. 2.4) при такій низькій температурі суттєвим є тільки один двоферміонний континуум збудження (той, що виникає внаслідок $\delta(\omega - \Lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} - \Lambda_{-\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}})$ в (2.16)) тоді як у протилежному випадку $D^2 > \gamma^2$ (ліві панелі рис. 2.4) всі три двоферміонних континууми збудження дають внесок у поперечну динаміку. На рис. 2.5 продемонстровано типові низькотемпературні частотні профілі $S_{zz}(0, \omega)$, $S_{zz}(\frac{\pi}{2}, \omega)$, $S_{zz}(\pi, \omega)$ для ланцюжка з $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $\Omega = 0.5$ та різних значень взаємодії Дзялошинського-Морія $D = 0, 0.5, 1$. На рис. 2.6 показано градієнтне зображення для $S_{zz}(\kappa, \omega)$ при середніх і високих температурах ($\beta J = 10, 1, 0.1$) для ланцюжка з $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$.

Надалі розглянемо zz динамічний структурний фактор на основі аналізу двоферміонного континууму збуджень. Так, zz динамічний структурний фактор (2.16) можна переписати у компактній формі

$$S_{zz}(\kappa, \omega) = \sum_{j=1}^3 S_{zz}^{(j)}(\kappa, \omega),$$

$$S_{zz}^{(j)}(\kappa, \omega) = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 B^{(j)}(\kappa_1, \kappa) C^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \delta\left(\omega - E^{(j)}(\kappa_1, \kappa)\right), \quad (2.18)$$

де запроваджено нові позначення для функцій

$$B^{(1)}(\kappa_1, \kappa) = B^{(3)}(\kappa_1, \kappa) = \frac{1 - f(\kappa_1, \kappa)}{4},$$

$$B^{(2)}(\kappa_1, \kappa) = \frac{1 + f(\kappa_1, \kappa)}{2}, \quad (2.19)$$

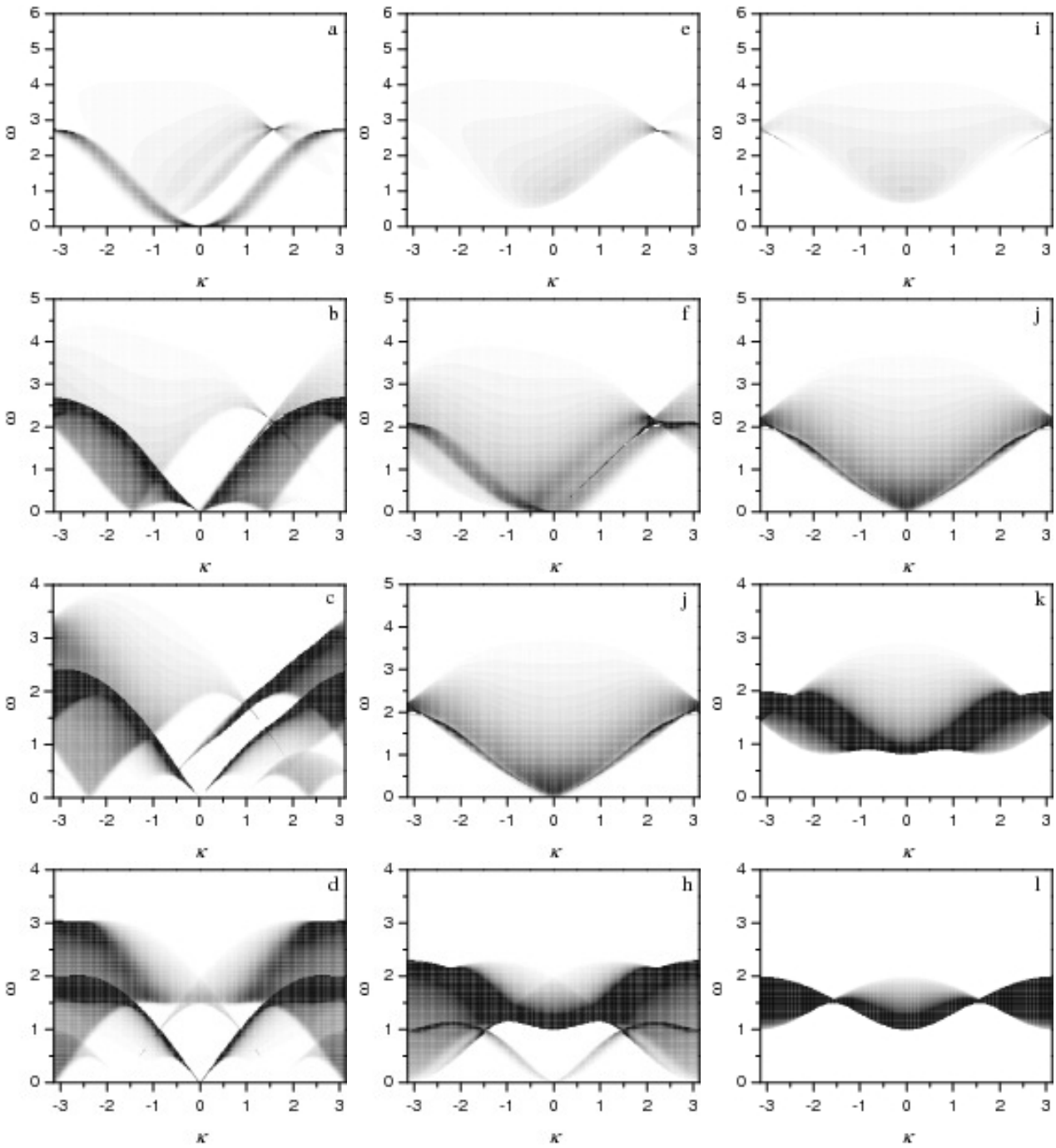


Рис. 2.4. Градієнтне зображення для zz динамічного структурного фактора $S_{zz}(\kappa, \omega)$ (2.16) спінового ланцюжка (1.4) з $J = 1$, $\gamma = 0.5$ при низькій температурі $\beta = 50$, для різної сили взаємодії Дзялошинського-Морія, $D = 0$ (права колонка), $D = 0.5$ (середня колонка), $D = 1$ (ліва колонка), і різних полів, $\Omega = 0, 0.5, 1, \frac{\sqrt{7}}{2}$ (знизу вгору).

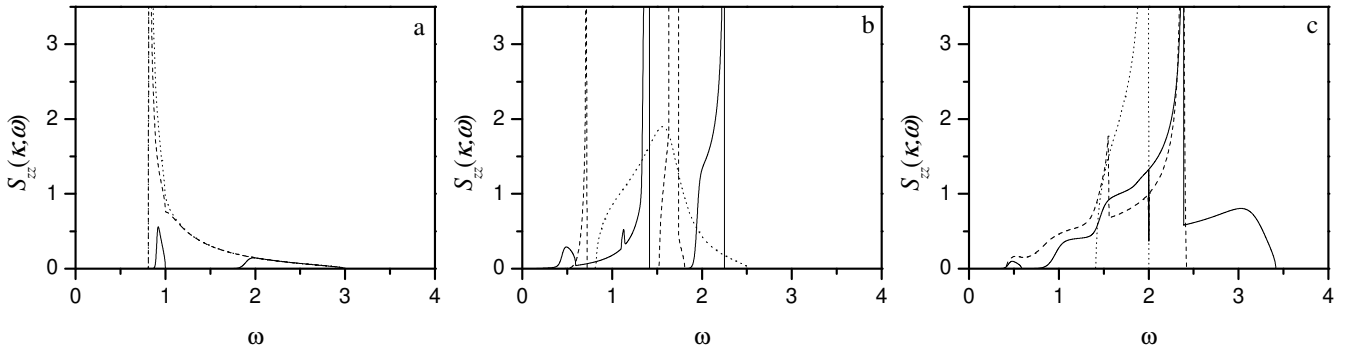


Рис. 2.5. Частотні профілі $S_{zz}(\kappa, \omega)$ на різних хвильових векторах $\kappa = 0$ (ліва панель), $\kappa = \frac{\pi}{2}$ (середня панель) і $\kappa = \pi$ (права панель) для спінового ланцюжка (1.4) з $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 0$ (пунктирні лінії), $D = 0.5$ (пунктирні лінії), $D = 1$ (суцільні лінії), $\Omega = 0.5$ при низькій температурі $\beta = 50$.

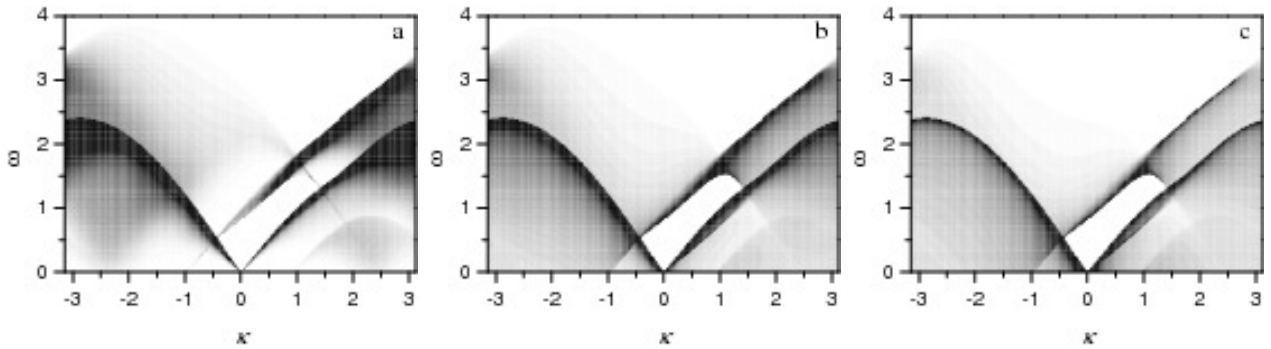


Рис. 2.6. Динамічний структурний фактор z_zz (2.16) для спінового ланцюжка (1.4) з $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$ при різних температурах $\beta = 10$ (а), $\beta = 1$ (б) і $\beta = 0.1$ (с).

$$\begin{aligned}
 C^{(1)}(\kappa_1, \kappa) &= (1 - n_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}) (1 - n_{-\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}), \\
 C^{(2)}(\kappa_1, \kappa) &= (1 - n_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}) n_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}, \\
 C^{(3)}(\kappa_1, \kappa) &= n_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}} n_{-\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}},
 \end{aligned} \tag{2.20}$$

$$\begin{aligned}
 E^{(1)}(\kappa_1, \kappa) &= \Lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} + \Lambda_{-\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}}, \\
 E^{(2)}(\kappa_1, \kappa) &= \Lambda_{\kappa_1 - \frac{\kappa}{2}} - \Lambda_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}, \\
 E^{(3)}(\kappa_1, \kappa) &= -\Lambda_{\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}} - \Lambda_{-\kappa_1 + \frac{\kappa}{2}}.
 \end{aligned} \tag{2.21}$$

Відповідно до рівняння (2.18) розрізняємо три двоферміонних континууми збуджень (вони відповідають $j = 1, 2, 3$ у рівнянні (2.18)), які визначають $S_{zz}(\kappa, \omega)$. Градієнтні зображення $S_{zz}^{(j)}(\kappa, \omega)$, $j = 1, 2, 3$ для типового набору параметрів, $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$, $\beta = 50$, показано на рис. 2.7. Як видно з формул

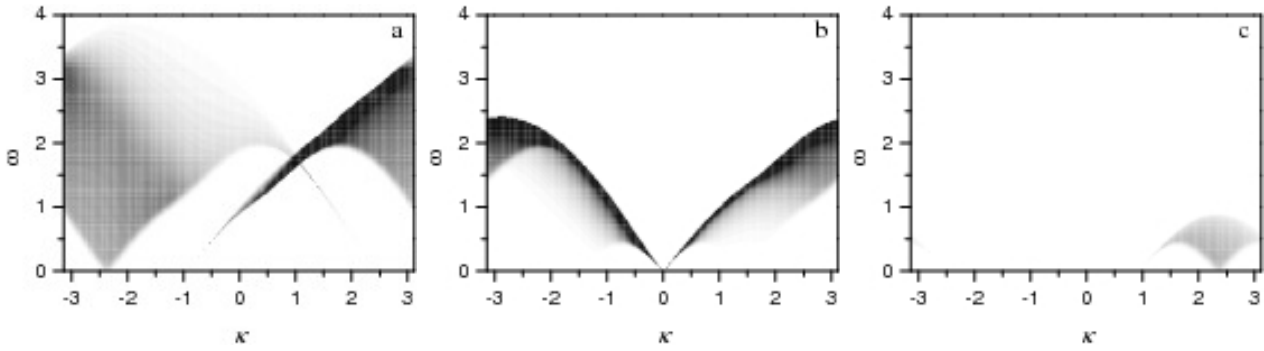


Рис. 2.7. Градієнтне зображення $S_{zz}^{(1)}(\kappa, \omega)$ (a), $S_{zz}^{(2)}(\kappa, \omega)$ (b) та $S_{zz}^{(3)}(\kappa, \omega)$ (c) для набору параметрів $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$, $\beta = 50$.

(2.18) і (2.19), (2.20), (2.21) особливості розглянутого двоферміонного динамічного структурного фактора, який описує динаміку поперечних спінових флуктуацій, визначаються функціями $B^{(j)}$. Ось чому на рис. 2.8 також зображено $S_{zz}^{(j)}(\kappa, \omega)$ (2.18) для того ж набору параметрів, що й на рис. 2.7, хоча, з $B^{(j)}(\kappa_1, \kappa) = 1$. Порівнюючи рис. 2.7 і 2.8 можна вирізнити специфічні (які походять від функцій $B^{(j)}$ (2.19)) і загальні (які походять від функцій $C^{(j)}$ (2.20) і $E^{(j)}$ (2.21)) властивості динамічної величини, що розглядається нижче. Вибираємо типовий набір

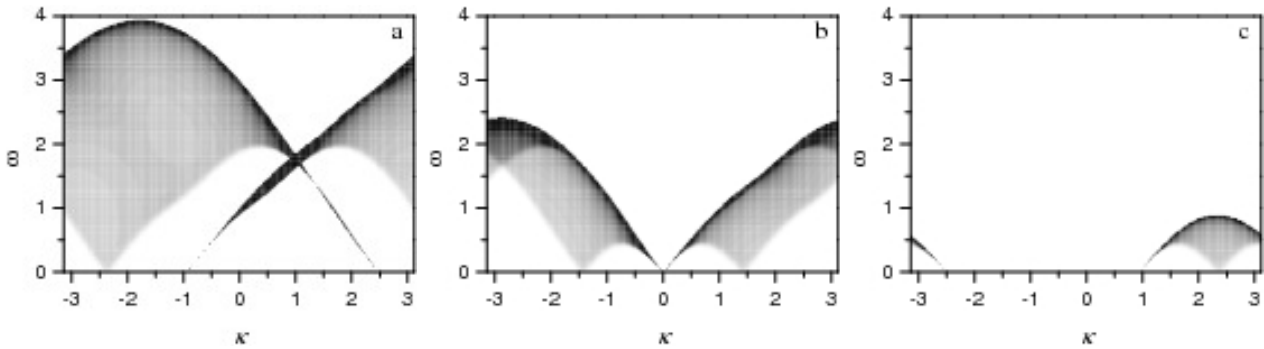


Рис. 2.8. Для порівняння $S_{zz}^{(j)}(\kappa, \omega)$ (2.18) з $B^{(j)}(\kappa_1, \kappa) = 1$ для того ж набору параметрів, що й на рис. 2.7. а: $j = 1$, b: $j = 2$, c: $j = 3$.

параметрів $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$ і розглянемо випадок безмежної температури $T \rightarrow \infty$ ($\beta = 0$). Двоферміонний динамічний структурний фактор може мати ненульові значення у площині хвильовий вектор κ – частота ω , якщо рівняння

$$\omega - E^{(j)}(\kappa_1, \kappa) = 0 \quad (2.22)$$

має принаймні один розв'язок κ_1^* , $-\pi \leq \kappa_1^* < \pi$. На рис. 2.9 (панелі (a)) для $j = 1$,

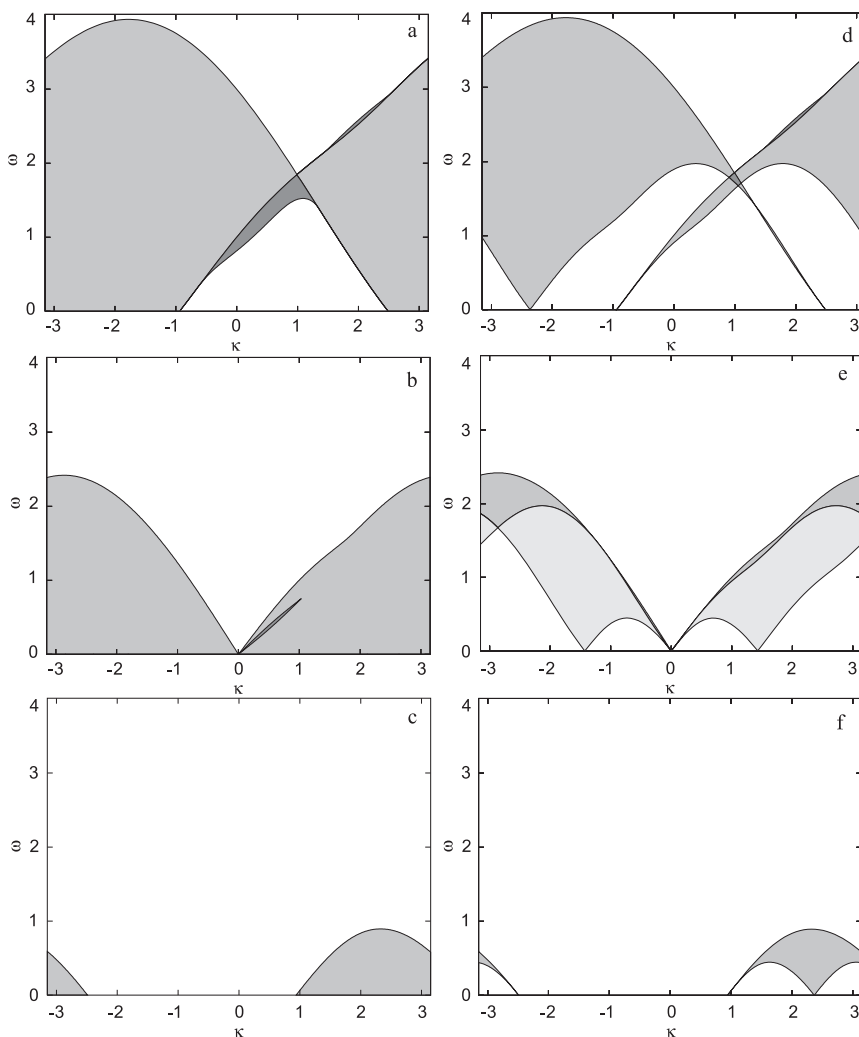


Рис. 2.9. До властивостей двоферміонних континуумів збудження; $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$; ліві панелі – границя безмежної температури $T \rightarrow \infty$ ($\beta = 0$), праві панелі – границя нульової температури $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$); $j = 1$ (панелі а і d), $j = 2$ (панелі b і e), $j = 3$ (панелі с і f).

(b) для $j = 2$, (c) для $j = 3$) показано області в площині κ - ω , у яких рівняння (2.22) має чотири розв'язки (темно-сірі області), два розв'язки (сірі області) або не має розв'язків (білі області). Обмежувальні лінії областей, у яких рівняння (2.22) має розв'язки складають верхню ($\omega_u^{(j)}(\kappa)$) і нижню ($\omega_l^{(j)}(\kappa) \leq \omega_u^{(j)}(\kappa)$) межі двоферміонного континууму збуджень, відповідно. Крім того, для деяких областей хвильового вектора κ нижні межі $\omega_l^{(j)}(\kappa)$ можуть дорівнювати нулю. З іншого боку, можна знайти верхню та нижню межі двоферміонного континууму збуджень, шукаючи максимальне та мінімальне значення $E^{(j)}(\kappa_1, \kappa)$ для κ_1 , яке

змінюється від $-\pi$ до π , тобто,

$$\omega_u^{(j)}(\kappa) = \max_{-\pi \leq \kappa_1 < \pi} \left\{ E^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \right\}, \quad \omega_l^{(j)}(\kappa) = \min_{-\pi \leq \kappa_1 < \pi} \left\{ 0, E^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \right\}. \quad (2.23)$$

Очевидно, що $\omega_u^{(j)}(\kappa)$ і $\omega_l^{(j)}(\kappa) \neq 0$ виникають для таких значень κ_1, κ_1^* , які задовольняють рівняння

$$\left. \frac{\partial}{\partial \kappa_1} E^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \right|_{\kappa_1 = \kappa_1^*} = 0. \quad (2.24)$$

Крім того, рівняння (2.24) також виконується вздовж границі $\omega(\kappa)$ між сірими і темно-сірими областями у верхній ($j = 1$) і середній ($j = 2$) панелях у лівій колонці на рис. 2.9. З іншого боку, величини

$$S^{(j)}(\kappa, \omega) = \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa_1 \mathcal{S}^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \delta(\omega - E^{(j)}(\kappa_1, \kappa)) = \sum_{\{\kappa_1^*\}} \left. \frac{\mathcal{S}^{(j)}(\kappa_1, \kappa)}{\left| \frac{\partial}{\partial \kappa_1} E^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \right|} \right|_{\kappa_1 = \kappa_1^*} \quad (2.25)$$

де $\{\kappa_1^*\}$ є розв'язками рівняння (2.22), можуть виявляти сингулярність ван Гова уздовж лінії $\omega_s^{(j)}(\kappa) = E^{(j)}(\kappa_1^*, \kappa)$, де κ_1^* задовольняє рівняння (2.24). Таким чином, згадані межі на панелях у лівій колонці рис. 2.9 є лініями особливостей ван Гова. Надалі, ми виявили це майже для всіх випадків $\frac{\partial^2}{\partial \kappa_1^2} E^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \neq 0$ для значень κ_1 , які задовольняють (2.22) з $\omega = \omega_s^{(j)}(\kappa)$, і це, очевидно, передбачає знайому кореневу розбіжність

$$S^{(j)}(\kappa, \omega) \propto \epsilon^{-\frac{1}{2}}, \quad (2.26)$$

коли ω наближається до $\omega_s^{(j)}(\kappa)$, $\epsilon = \left| \omega - \omega_s^{(j)}(\kappa) \right|$. однак, для $j = 2$ і $\kappa \approx 1.07844531$ (див. рис. 2.9(b)) рівняння (2.24) виконується для $\kappa_1 \approx 2.16480069$ і у цій точці $\frac{\partial^2}{\partial \kappa_1^2} E^{(2)}(\kappa_1, \kappa) = 0$, але $\frac{\partial^3}{\partial \kappa_1^3} E^{(2)}(\kappa_1, \kappa) \approx 2.96548741 \neq 0$. В результаті, якщо ω знаходиться в ϵ -околі $\omega_s^{(2)}(\kappa \approx 1.07844531) \approx 0.78594502$ величина $S^{(2)}(\kappa, \omega)$ (2.25) виявляє сингулярність з іншим показником

$$S^{(2)}(\kappa \approx 1.07844531, \omega \approx 0.78594502 \pm \epsilon) \propto \epsilon^{-\frac{2}{3}}. \quad (2.27)$$

Різні типи сингулярностей проілюстровано на рис. 2.10. Зокрема, на рис. 2.10(a) можна побачити кореневі розбіжності (2.26), тоді як на рис. 2.10(b), крім розбіжностей квадратного кореня (2.26) (суцільні та пунктирні криві) спостерігається

залежність (2.27) (пунктирна крива). При цьому, сингулярність $\epsilon^{-\frac{2}{3}}$ залишається для інших значень D , а також присутня, коли $D \rightarrow 0$. Для $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 0$, $\Omega = 0.5$ це відбувається при $\kappa \approx 1.68213734$, а ω наближається до $\omega_s^{(2)}(\kappa \approx 1.68213734) = 0$. Цікаво, що цей факт не вдалося виявити в попередньому дослідженні про динаміку zz в анізотропному XU ланцюжку в поперечному полі без взаємодії Дзялошинського-Морія [224], оскільки це дослідження відноситься до випадку нульової температури коли в поперечній спіновій динаміці проявляється лише континуум $j = 1$ (див. обговорення після рівняння (2.17)). З іншого боку, сингулярність $\epsilon^{-\frac{2}{3}}$ важко виявити через те, що ця особливість має місце лише при одному конкретному значенні κ (на відміну від сингулярності $\epsilon^{-\frac{1}{2}}$). Проте, для значень хвильового вектора поблизу цього конкретного значення легко вгадується відтворення сингулярності $\epsilon^{-\frac{2}{3}}$ (див. пунктирну криву на рис. 2.10b).

Наостанок зауважимо, що для деяких ліній, що характеризують двоферміонний континуум збудження ми можемо дати прості аналітичні вирази. Таким чином, для $j = 1$ максимум/мінімум $E^{(j)}(\kappa_1, \kappa)$ спостерігається при $\kappa_1 = 0$ і $\kappa_1 = -\pi$ і, отже, відповідні граничні лінії задані $E^{(1)}(0, \kappa)$ і $E^{(1)}(-\pi, \kappa)$. Ми не знайшли простих аналітичних виразів для межі між білими і темно-сірими областями і для ненульової нижньої межі (див. рис. 2.9(a)). Для $j = 3$ верхня межа визначається як $E^{(3)}(0, \kappa)$ і $E^{(3)}(-\pi, \kappa)$.

Далі перейдемо до випадку нульової температури $T = 0$ ($\beta \rightarrow \infty$) для яких важливим стає вплив функцій Фермі, що входять до функцій $C^{(j)}$. Тут функції Фермі обмежують область можливих значень κ_1 у рівнянні (2.22); тепер κ_1 змінюється лише в частині області між $-\pi$ і π де $C^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \neq 0$. На рис. 2.9 ((d) для $j = 1$, (e) для $j = 2$, (f) для $j = 3$) показано області в площині $\kappa-\omega$, в яких рівняння (2.22) з урахуванням умови $C^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \neq 0$ має чотири розв'язки (темно-сірі області), два розв'язки (сірі області), один розв'язок (світло-сірі області) або не має розв'язків взагалі (білі області). Верхню та нижню межі також можна знайти з умов (2.23), коли κ_1 змінюється в інтервалі від $-\pi$ до π , де $C^{(j)}(\kappa_1, \kappa) \neq 0$. Значення κ , при яких $\omega_l^{(j)}(\kappa) = 0$ відповідають потенційним м'яким модам κ_c (див. праві панелі на рис. 2.9). Двоферміонні динамічні величини можуть демонструва-

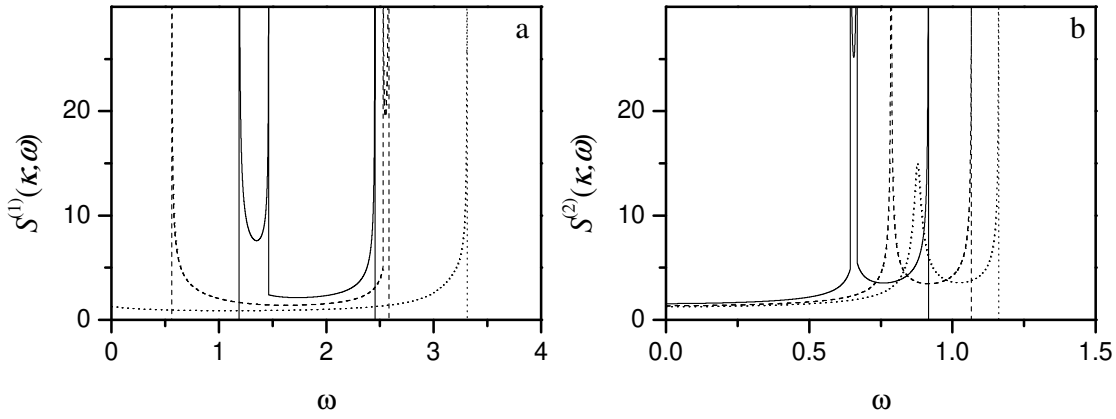


Рис. 2.10. Частотні профілі (2.25) (з $\mathcal{S}^{(j)}(\kappa_1, \kappa) = 1$) для ланцюжка (1.4) з $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$, $\beta = 0$, які ілюструють сингулярності ван Гова з різними показниками $\frac{1}{2}$ і $\frac{2}{3}$. (а): $S^{(1)}(\kappa, \omega)$ (2.25) проти ω в $\kappa = 0.5$ (суцільна лінія), $\kappa = 2$ (пунктирна лінія), $\kappa = 3$ (пунктирна лінія); (б): $S^{(2)}(\kappa, \omega)$ (2.25) проти ω в $\kappa = 0.9$ (суцільна лінія), $\kappa \approx 1.07844531$ (пунктирна лінія; низькочастотна сингулярність має степеневий показник $\frac{2}{3}$), $\kappa = 1, 2$ (пунктирна лінія).

ти виявлені вище сингулярності ван Гова, якщо їх поява не заборонена функціями Фермі (та функціями $B^{(j)}$ порівняйте рис. 2.7 і 2.8). Крім того, уздовж меж між областями площини κ - ω , що відповідає різним номерам розв'язку рівняння (2.22) двоферміонні динамічні величини можуть різко змінювати свої значення, демонструючи скінченний стрибок (наприклад, ми маємо на увазі межу між сірими та світло-сірими областями на рис. 2.9(e); див. також рис. 2.7(b) і 2.8(b)). Ми можемо записати аналітичні вирази для деяких характерних ліній, зображених на рис. 2.9(d), 2.9(e), 2.9(f). Введемо

$$\cos \kappa_{\pm} = \frac{-\Omega J \pm \sqrt{(D^2 - \gamma^2)(J^2 + D^2 - \gamma^2 - \Omega^2)}}{J^2 + D^2 - \gamma^2}, \quad D \sin \kappa_{\pm} < 0; \quad (2.28)$$

κ_{\pm} задовольняють рівнянню $\Lambda_{\kappa_{\pm}} = 0$. Для обраного набору параметрів $J = 1$, $\gamma = 0.5$, $D = 1$, $\Omega = 0.5$ отримуємо $\kappa_+ \approx -1,24466864$, $\kappa_- \approx -2,67211739$. Лінії $\Lambda_{-\kappa_{\pm}-\kappa}$ утворюють нижню межу континууму $j = 1$; лінії $\Lambda_{\kappa_{\pm}-\kappa}$, $-\Lambda_{\kappa_{\pm}+\kappa}$ утворюють нижню межу континууму $j = 2$; рядки $-\Lambda_{\kappa-\kappa_{\pm}}$ утворюють нижню межу континууму $j = 3$. Режимми з м'якими модами можуть виникати при значеннях хвильового вектора $-2\kappa_{\pm}$, $-\kappa_+ - \kappa_-$ ($j = 1$), 0 , $\pm(\kappa_+ - \kappa_-)$ ($j = 2$), $2\kappa_{\pm}$, $\kappa_+ + \kappa_-$ ($j = 3$).

Підкреслимо також роль функцій $B^{(j)}$ (2.19), які відповідають за специфічні особливості динамічного поперечного спінового структурного фактора $S_{zz}(\kappa, \omega)$. Функції $B^{(j)}(\kappa_1, \kappa)$ змінюють та ускладнюють структуру $S_{zz}(\kappa, \omega)$ в площині κ - ω (порівняйте рис. 2.7 і рис. 2.8, 2.9(d), 2.9(e), 2.9(f) для випадку низьких температур і рис. 2.6(c) і рис. 2.9(a), 2.9(b), 2.9(c) для випадку високих температур). Зокрема, функція $B^{(2)}(\kappa_1, \kappa)$ видаляє м'які моди при $\kappa = \pm(\kappa_+ - \kappa_-)$ але не при $\kappa = 0$ (див. рис. 2.7(b)). Крім того, порівнюючи рис. 2.7(a), 2.7(c) і 2.8(a), 2.8(c) видно, що сингулярності ван Гова вздовж ліній $\omega = E^{(1)}(0, \kappa)$, $\omega = E^{(1)}(-\pi, \kappa)$ (рис. 2.7(a) і 2.8(a)) і вздовж ліній $\omega = E^{(3)}(0, \kappa)$, $\omega = E^{(3)}(-\pi, \kappa)$ (рис. 2.7(c) і 2.8(c)) зникають, оскільки $B^{(1)}(0, \kappa) = B^{(3)}(0, \kappa) = B^{(1)}(-\pi, \kappa) = B^{(3)}(-\pi, \kappa) = 0$.

У підсумку, двоферміонні динамічні структурні фактори мають ненульове значення лише в обмеженій області площини κ - ω і можуть демонструвати сингулярності ван Гова не лише з показником $1/2$, а й з показником $2/3$. Крім того, при нульовій температурі двоферміонні динамічні структурні фактори можуть зазнавати стрибків, при яких їх значення різко зростають на скінченну величину.

2.5. Висновки

У цьому розділі представлено результати комплексного дослідження динамічних структурних факторів спін- $1/2$ ХУ ланцюжків у поперечному полі із взаємодією Дзялошинського-Морія, які охоплюють явні аналітичні вирази і точні числові дані. Показано, що xx (yy), xy (yx) динамічні величини можна використовувати для визначення значення взаємодії Дзялошинського-Морія. Також проаналізовано спектр поглинання ESR для спін- $1/2$ ХХ ланцюжка з взаємодією Дзялошинського-Морія.

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 збу-

джень 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 збудження, які відповідають конкретним лініям двоферміонних континуумів збуджень.

Взаємодія Дзялошинського-Морія чітко проявляється у профілях частота-хвильовий вектор, що дає змогу визначити величину цієї взаємодії шляхом вимірювання динамічних структурних факторів. Динамічні структурні фактори можна отримати з поперечного перерізу розсіяння нейтронів.

В останні роки, слідуючи прогресу в матеріалознавстві, помітно зріс інтерес до сполук, магнітна структура яких відповідає квантовим спіновим ланцюжкам. Деякі з цих сполук є доброю реалізацією одновимірної спін- $1/2$ XX моделі (наприклад, Cs_2CoCl_4 було запропоновано як можливий квазіодновимірний XU -подібний магнетик) [163, 226, 301]. Динамічні експерименти є важливим інструментом для дослідження цих сполук. Розсіяння нейтронів, ESR, ядерний магнітний резонанс (див., наприклад, статтю [302]) тощо дають експериментальні дослідження динамічних властивостей, які необхідно порівняти з теоретичними прогнозами. Тому строгі результати, отримані в цьому розділі, дозволяють зрозуміти в рамках простої моделі, як взаємодія Дзялошинського-Морія проявляється у величинах, доступних для експериментального дослідження.

РОЗДІЛ 3

ДИНАМІКА ДЕЯКИХ РЕГУЛЯРНО-НЕОДНОРІДНИХ ТА ВИПАДКОВИХ СПІН-1/2 ХУ ЛАНЦЮЖКІВ

У цьому розділі досліджено динамічні структурні фактори спін-1/2 ланцюжків із взаємодіями найближчих сусідів типу XX та Дзялошинського-Морія, і з періодичними і випадковими змінами знаку цих взаємодій. Цей особливий вид неоднорідності можна усунути з гамільтоніана відповідним перетворенням спінових змінних. У результаті динамічні структурні фактори періодичних або випадкових ланцюжків можна обчислити з однорідних ланцюжків. Використовуючи точні аналітичні та числові результати, доступні для однорідних систем, проілюстровано наслідки регулярного чергування або випадкового безладу на динамічні структурні фактори квантових спінових ланцюжків.

Основні результати цього розділу викладені у роботах [13, 14, 42].

3.1. Точно розв'язний XX ланцюжок з періодичною або випадковою зміною знаку взаємодії

Ми розглядаємо гамільтоніан неоднорідної одновимірної спін-1/2 XX моделі із білінійною взаємодією між найближчими сусідами, який можна точно дослідити за допомогою перетворення Йордана-Вігнера [108, 216]:

$$H = \sum_n (J_n (s_n^x s_{n+1}^x + s_n^y s_{n+1}^y) + D_n (s_n^x s_{n+1}^y - s_n^y s_{n+1}^x) + \Omega s_n^z), \quad (3.1)$$

де J_n — обмінна XX взаємодія між сусідніми вузлами n і $n+1$, D_n — z -компонента взаємодії Дзялошинського-Морія між цими вузлами, Ω — зовнішнє поперечне магнітне поле. Сума в (3.1) береться за всіма N вузлами; граничні умови (періодичні

або відкриті) не є істотними для розглянутих нижче величин, які обчислюються в термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$.

Динамічні структурні фактори моделі (1.1), які відтворюються в ESR експериментах та непружному розсіянні нейтронів, містять важливу інформацію про мікроскопічний стан спінової моделі (3.1). Згідно симетрії $S_{xx}(\kappa, \omega) = S_{yy}(\kappa, \omega)$, $S_{xy}(\kappa, \omega) = -S_{yx}(-\kappa, \omega)$, тому у подальшому можна зосередитися лише на обчисленні $S_{xx}(\kappa, \omega)$, $S_{xy}(\kappa, \omega)$ і $S_{zz}(\kappa, \omega)$. Крім того, модель (3.1) передбачає відсутність намагніченості перпендикулярно до прикладеного поля $\langle s_n^x \rangle = \langle s_n^y \rangle = 0$, і, отже, другий член у дужках у рівнянні (1.1) можна опустити, якщо $\alpha, \beta = x, y$.

В наступних параграфах ми використаємо відомі результати для однорідних спін-1/2 XY ланцюжків (див. розділ 1.3), щоб дослідити динамічні властивості квантових спінових ланцюжків з різними типами періодично змінних або випадково розподілених обмінних взаємодій.

3.2. Динамічний структурний фактор ланцюжків з неоднорідністю у знаку взаємодії

Спочатку розглянемо спінову модель (3.1), 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 антиферомагнітною, якщо $\lambda_n J > 0$, або феромагнітною, якщо $\lambda_n J < 0$ залежно від заданої послідовності $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$. Якщо здійснити калібрувальне перетворення

$$\begin{aligned} s_n^x &\rightarrow \tilde{s}_n^x = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{n-1} s_n^x, \\ s_n^y &\rightarrow \tilde{s}_n^y = \lambda_1 \lambda_2 \dots \lambda_{n-1} s_n^y, \\ s_n^z &\rightarrow \tilde{s}_n^z = s_n^z, \end{aligned} \tag{3.2}$$

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 величи-

ни, інваріантні відносно калібрувального перетворення (3.2), і тому не залежать від неоднорідної послідовності знаків $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$. На противагу цьому, xx і xu динамічні структурні фактори насправді залежать від конфігурації $\{\lambda_1, \dots, \lambda_N\}$. Нижче, ми окремо розглянемо випадки періодичних послідовностей і випадкових послідовностей знаків.

3.2.1. Періодичні ланцюжки

Почнімо з випадку періоду $p = 2$, тобто $\{\lambda_n\} = \{1, -1, 1, -1, \dots\}$. Після перетворення (3.2) отримуємо $\tilde{s}_{2j-1}^\alpha = (-1)^{j+1} s_{2j-1}^\alpha$, $\tilde{s}_{2j}^\alpha = (-1)^{j+1} s_{2j}^\alpha$, $j = 1, 2, \dots$ (тут і до кінця розділу $\alpha, \beta = x, y$). В результаті, відповідно до означення (1.1), динамічні структурні фактори моделі з періодом 2 матимуть такий вигляд:

$$S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega) = \frac{1}{2} \tilde{S}_{\alpha\beta} \left(\kappa + \frac{\pi}{2}, \omega \right) + \frac{1}{2} \tilde{S}_{\alpha\beta} \left(\kappa + \frac{3\pi}{2}, \omega \right), \quad (3.3)$$

де динамічні структурні фактори $\tilde{S}_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)$ стосуються однорідного ланцюжка з обмінною константою J . Ці розрахунки можна легко поширити на спінові ланцюжки більших періодів. Наприклад, для $p = 3$ з $\{\lambda_n\} = \{1, 1, -1, 1, 1, -1, \dots\}$ після виконання аналогічних розрахунків отримуємо замість рівняння (3.3) такий результат:

$$S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega) = \frac{4}{9} \tilde{S}_{\alpha\beta} \left(\kappa + \frac{\pi}{3}, \omega \right) + \frac{1}{9} \tilde{S}_{\alpha\beta} (\kappa + \pi, \omega) + \frac{4}{9} \tilde{S}_{\alpha\beta} \left(\kappa + \frac{5\pi}{3}, \omega \right). \quad (3.4)$$

Щоб проілюструвати вплив регулярного змінного знака обмінної взаємодії на $S_{xx}(\kappa, \omega)$ наводимо на рис. 3.1 цю величину, яка розраховується згідно з рівняннями (3.3), (3.4). Очевидно, що у високотемпературній границі внаслідок незалежності від κ у $S_{xx}(\kappa, \omega)$ (див. рівняння (1.16)) регулярне чергування знаків обмінної взаємодії не проявляється у динамічному структурному факторі xx . Однак за низьких температур це може призвести до досить запутаної залежності від частоти та хвильового вектора (див. рис. 3.1). Цікаво, що можна відтворити послідовність $\{\lambda_n\}$ знаючи кількість м'яких мод κ_0 і їх положення. У границі $T = 0$ і $|\Omega| > |J|$ ми можемо підставити рівняння (1.14) у праву частину рівнянь

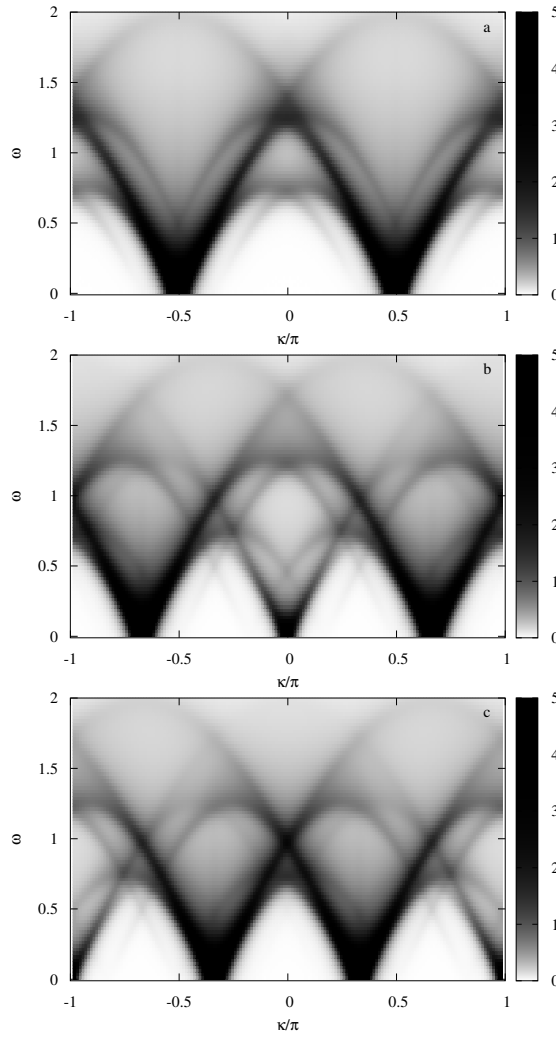


Рис. 3.1. $S_{xx}(\kappa, \omega)$ для спін-1/2 XX ланцюжка з періодичною послідовністю обмінних взаємодій $\{J, -J, J, -J, \dots\}$, $J = 1$ (a) і $\{J, J, -J, J, J, -J, \dots\}$ з $J = 1$ (b) та з $J = -1$ (c) для $\Omega = 0.25$ при низькій температурі, $\beta = 20$.

(3.3), (3.4), щоб довести, що спектральна вага зосереджена вздовж кривих які впливають з рівняння (1.15) після відповідних зміщень вздовж осі κ .

3.2.2. Випадкові ланцюжки

Тепер перейдемо до випадку випадково розподілених знаків обмінних взаємодій, припускаючи, що $\{\lambda_n\}$ є послідовністю незалежних випадкових величин, кожна з таким бімодальним розподілом ймовірностей

$$p(\lambda_n) = p\delta(\lambda_n + 1) + (1 - p)\delta(\lambda_n - 1), \quad (3.5)$$

де $0 \leq p \leq 1$. Нас цікавитимуть випадково-усереднені величини і позначимо середнє за всіма реалізаціями випадковості як $\overline{(\dots)} = \prod_n \int_{-\infty}^{\infty} d\lambda_n p(\lambda_n)(\dots)$. Зауважимо, що випадкові ланцюжки такого типу, фактично, для більш загальної XXZ взаємодії досліджувалися і раніше [303, 304].

Застосувавши калібрувальне перетворення (3.2) та усереднивши за розподілом (3.5), знаходимо

$$\overline{\langle s_j^\alpha(t) s_{j+m}^\beta \rangle} = (1 - 2p)^{|m|} \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle. \quad (3.6)$$

Запровадивши кореляційну довжину $\xi = -1/\ln |1 - 2p|$, вираз (3.6) можна переписати у компактній формі

$$\overline{\langle s_j^\alpha(t) s_{j+m}^\beta \rangle} = \begin{cases} \exp\left(-\frac{|m|}{\xi}\right) \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle, & 0 \leq p \leq \frac{1}{2}, \\ (-1)^m \exp\left(-\frac{|m|}{\xi}\right) \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle, & \frac{1}{2} \leq p \leq 1. \end{cases} \quad (3.7)$$

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

$$\overline{S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)} = \sum_{m=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \exp\left(-i\kappa m - \frac{|m|}{\xi}\right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle \tilde{s}_j^\alpha(t) \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle, \quad (3.8)$$

де $0 \leq p \leq 1/2$. Якщо $1/2 \leq p \leq 1$, множник $(-1)^m$ (див рівняння (3.7)) потрібно взяти до уваги у рівнянні (3.8) і отриманий вираз $\overline{S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)}$ для $1/2 \leq p \leq 1$ відповідає $\overline{S_{\alpha\beta}(\kappa \mp \pi, \omega)}$ в рівнянні (3.8). Ми використовуємо рівняння (3.8), щоб обчислити $\overline{S_{\alpha\beta}(\kappa, \omega)}$ 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 [228, 266, 267] (див. рис. 3.2).

У випадку $T = 0$, $|\Omega| > |J|$, коли xx динамічний структурний фактор $\tilde{S}_{xx}(\kappa, \omega)$ задається рівнянням (1.14), можна отримати точні аналітичні вирази [13]. Тут ми розглянемо детальніше випадок $T \neq 0$ та поля менші за критичне $|\Omega| < J$, де вираз (3.8) потрібно розрахувати числовим методом (див. рис. 3.2). У випадку $p = 1/2$ кореляційна довжина $\xi \rightarrow 0$, а, отже, лише автокореляційна функція дає вклад у κ -незалежний $\overline{S_{xx}(\kappa, \omega)}$ і форма частотної залежності для

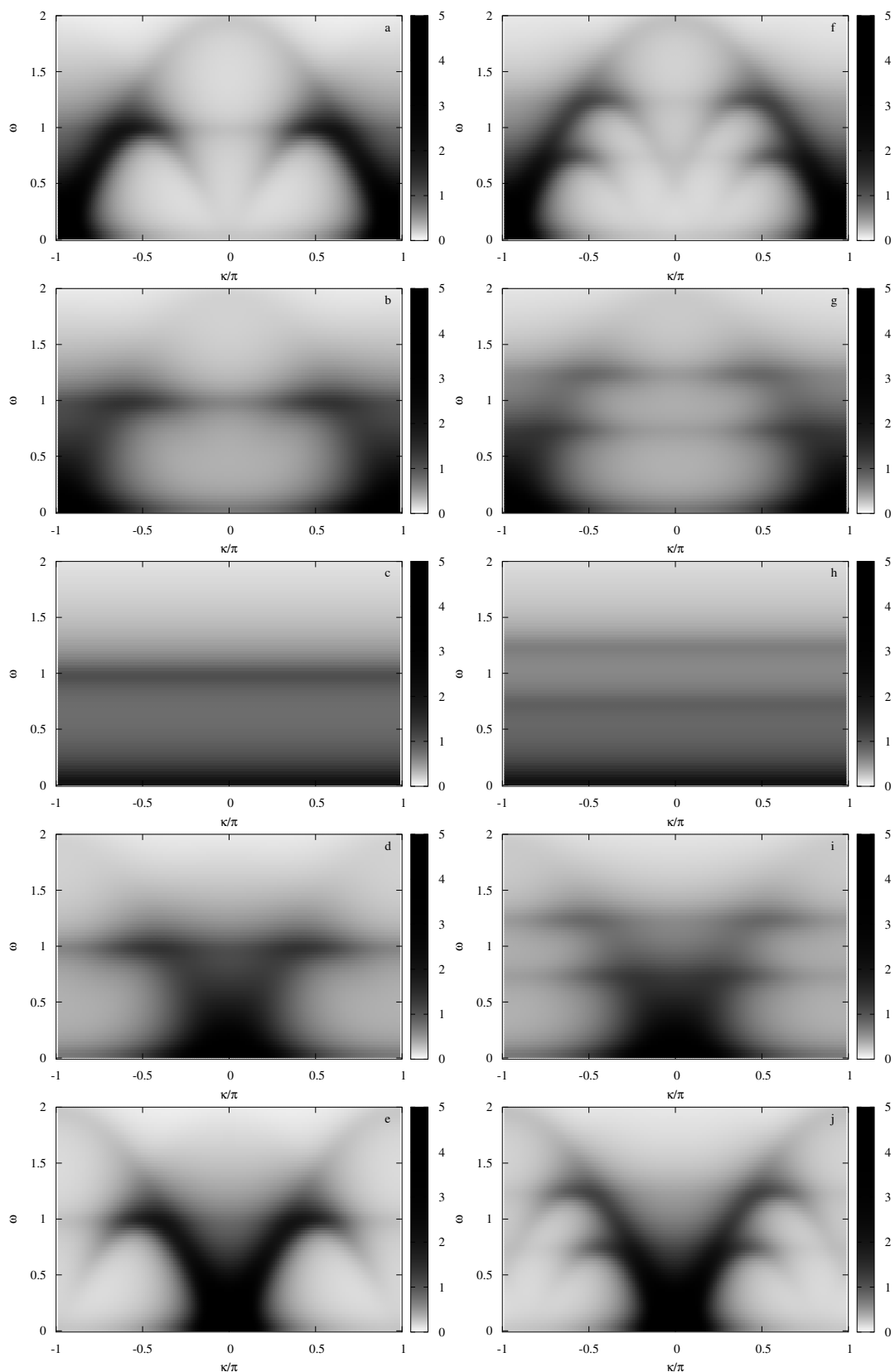


Рис. 3.2. $\overline{S_{xx}(\kappa, \omega)}$ для спін-1/2 XX ланцюжка з випадковим знаком взаємодії $J = 1$, $\Omega = 0.01$ (ліві панелі, а ... е), $\Omega = 0.25$ (праві панелі, f ... j), $\beta = 20$: згори до низу $p = 0.1$ ($\xi \approx 4.48$), $p = 0.25$ ($\xi \approx 1.44$), $p = 0.5$ ($\xi = 0$), $p = 0.75$ ($\xi \approx 1.44$), $p = 0.9$ ($\xi \approx 4.48$).

будь-якого κ визначається $\tilde{S}_{xx}(0, \omega) = \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp(i\omega t) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_j^x \rangle$ (κ -незалежні смуги поблизу частот, які домінують у автокореляційній функції).

Відзначаємо деякі подібності до числових результатів на спіні-1/2 ланцюжку Ізинга у випадковому поперечному полі [305]. Зокрема, горизонтальні (κ -незалежні) смугасті візерунки на рис. 3.2 нагадують результати роботи [305] для сильного безладу. Це слід було очікувати, оскільки для достатньо сильного безладу виживають лише локальні кореляції і призводять до κ -незалежного динамічного структурного фактора.

Схему представлену тут також можна легко адаптувати до складніших моделей, де зміщуються чергування та випадковість. Наприклад, на магнетоактивну сполуку $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{Cu}(\text{Cl}_x\text{Br}_{1-x})_3$ з випадковою феромагнітно-антиферомагнітною взаємодією можна подивитись як на випадковий квантовий ланцюжок Гайзенберга зі спіном 1/2 [306],

$$H = \sum_n (J_{2n-1} \vec{s}_{2n-1} \cdot \vec{s}_{2n} + J_{2n} \vec{s}_{2n} \cdot \vec{s}_{2n+1}), \quad (3.9)$$

де $J_{2n-1} = J$ – слабка однорідна обмінна взаємодія, $J_{2n} = 2\lambda_{2n}J$ – сильний обмінний зв'язок з випадковим знаком, а $\{\lambda_{2n}\}$ – послідовність незалежних випадкових величин, кожна з бімодальним розподілом ймовірностей (3.5). Якщо ми обмежимося ізотропною взаємодією XU між спінами в (3.9), випадковість можна виключити з гамільтоніана дещо модифікованим калібрувальним перетворенням $\tilde{s}_{2n-1}^\alpha = s_{2n-1}^\alpha \prod_{m=1}^{n-1} \lambda_{2m}$, $\tilde{s}_{2n}^\alpha = s_{2n}^\alpha \prod_{m=1}^{n-1} \lambda_{2m}$, $n = 2, 3, \dots$, остаточно отримуючи гамільтоніан димеризованого ланцюжка XX з періодично змінними обмінними зв'язками $J, 2J, J, 2J, \dots$. Випадково усереднені динамічні структурні фактори можна розрахувати аналогічно до рівнянь (3.6) – (3.8).

3.3. XU ланцюжки з неоднорідністю у знаку взаємодії Дзялошинського-Морія

Тепер розглянемо спінову модель (3.1), поклавши $J_n = J$ і $D_n = \lambda_n D$ з $\lambda_n = \pm 1$. Зазначимо, що випадок $J_n = \lambda_n J$, $D_n = D$ можна проаналізувати

на основі наведених нижче результатів після використання унітарного перетворення, розглянутого в роботі [307]. Взаємодію Дзялошинського-Морія D_n можна виключити з гамільтоніана (3.1) (з точністю до несуттєвого граничного доданку) за допомогою неоднорідного перетворенням поворотів у спіновому просторі [12, 71, 272, 273, 298], яке у нашому випадку матиме такий вигляд

$$\begin{aligned} s_n^x &\rightarrow \tilde{s}_n^x = \cos \phi_n s_n^x + \sin \phi_n s_n^y, \\ s_n^y &\rightarrow \tilde{s}_n^y = -\sin \phi_n s_n^x + \cos \phi_n s_n^y, \\ s_n^z &\rightarrow \tilde{s}_n^z = s_n^z, \end{aligned} \quad (3.10)$$

де $\phi_n = \sum_{m=0}^{n-1} \varphi_m$, φ_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 $\tilde{J}_n = \text{sgn}(J)\sqrt{J^2 + D_n^2}$. У однорідному випадку, коли $D_n = D$, унітарне перетворення (3.10) було використано в останніх дослідженнях динаміки квантових спінових ланцюжків [12, 272, 273].

Тут зупинимось детальніше на випадку наявності в гамільтоніані взаємодії Дзялошинського-Морія з випадковим знаком $D_n = \lambda_n D$, де послідовність незалежних випадкових змінних $\{\lambda_n\}$ задається бімодальним розподілом (3.5). Для окремої реалізації знаків взаємодії Дзялошинського-Морія неоднорідності D_n з гамільтоніану можна позбутися перетворенням повороту (3.10) з $\varphi_m = \lambda_m \varphi$, $\varphi = \arctan(D/J)$. В результаті, отримуємо однорідну модель \tilde{H} , де залишається лише XX обмінна взаємодія з константою $\tilde{J} = \text{sgn}(J)\sqrt{J^2 + D^2}$. Насамперед, потрібно знайти часову кореляційну функцію усереднену за випадковими конфігураціями

$$\overline{\langle s_j^x(t) s_{j+m}^x \rangle} = \overline{\cos(\phi_{j+m} - \phi_j) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_{j+m}^x \rangle} - \overline{\sin(\phi_{j+m} - \phi_j) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_{j+m}^y \rangle}. \quad (3.11)$$

Зауваживши, що

$$\begin{aligned} \overline{\cos((\lambda_1 + \dots + \lambda_m) \varphi)} &= \frac{1}{2} (p \exp(-i\varphi) + (1-p) \exp(i\varphi))^m \\ &\quad + \frac{1}{2} (p \exp(i\varphi) + (1-p) \exp(-i\varphi))^m \end{aligned}$$

$$= (\cos^2 \varphi + (1 - 2p)^2 \sin^2 \varphi)^{\frac{m}{2}} \cos (m \arctan ((1 - 2p) \tan \varphi)),$$

$$\overline{\sin ((\lambda_1 + \dots + \lambda_m) \varphi)} = (\cos^2 \varphi + (1 - 2p)^2 \sin^2 \varphi)^{\frac{m}{2}} \sin (m \arctan ((1 - 2p) \tan \varphi)) \quad (3.12)$$

і запровадивши позначення $\xi_D = -1/\ln \sqrt{\cos^2 \varphi + (1 - 2p)^2 \sin^2 \varphi}$, $\varphi_D = \arctan ((1 - 2p) \tan \varphi)$, зображаємо такі усереднені кореляційні функції у компактній формі

$$\overline{\langle s_j^x(t) s_{j+m}^x \rangle} = \exp \left(-\frac{|m|}{\xi_D} \right) (\cos (m\varphi_D) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_{j+m}^x \rangle - \sin (m\varphi_D) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_{j+m}^y \rangle). \quad (3.13)$$

Використовуючи рівняння (3.13), можна легко отримати xx динамічний структурний фактор, усереднений за випадковими конфігураціями

$$\overline{S_{xx}(\kappa, \omega)} = \sum_{m=0, \pm 1, \pm 2, \dots} \exp \left(-i\kappa m - \frac{|m|}{\xi_D} \right) \int_{-\infty}^{\infty} dt \exp (i\omega t)$$

$$\times (\cos (m\varphi_D) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_{j+m}^x \rangle - \sin (m\varphi_D) \langle \tilde{s}_j^x(t) \tilde{s}_{j+m}^y \rangle). \quad (3.14)$$

У правій стороні рівняння (3.14) маємо кореляційну функцію однорідного XX ланцюжка з обмінною константою $\text{sgn}(J)\sqrt{J^2 + D^2}$. Тепер можна використати рівняння (3.14), щоб розрахувати $\overline{S_{xx}(\kappa, \omega)}$ для моделі з випадковою взаємодією Дзялошинського-Морія, використовуючи відомі результати для $\langle \tilde{s}_j^\alpha \tilde{s}_{j+m}^\beta \rangle$ [228, 266]. Визначальною відмінністю для випадкової конфігурації D_n є те, що на відміну від попереднього випадку випадкових J_n кореляційна довжина ξ_D не обертається в нуль при рівномірному розподілі знаків $p = 1/2$.

3.4. Висновки

У цьому розділі, розглянуто ряд неоднорідних (періодичних або випадкових) спін-1/2 XX ланцюжків, щоб вивчити їх динамічні властивості. Ці моделі вирізняються можливістю усунення неоднорідності зі спінового гамільтоніана відповідним унітарним перетворенням (див. рівняння (3.2), (3.10)) і, отже, задачу можна звести до відомої просторово однорідної моделі. Точні аналітичні та точні числові дані використовуються далі для аналізу динамічних структурних

факторів періодичних та випадкових спінів- $1/2$ XX ланцюжків. Розглянуті моделі демонструють досить складну поведінку, яку можна пояснити відповідними властивостями базової однорідної моделі. Таким чином, для періодичних ланцюжків лише відповідно видозмінені характеристичні криві рівняння (1.13), (1.15) видно у складній картині, що відображається динамічним структурним фактором при низьких температурах. Продемонстровано, що 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 і подальше усереднення за цими реалізаціями.

Цікаво відзначити, що вплив температури та випадкових взаємодій на xx і xy динамічні структурні фактори різні. Хоча в обох випадках лише автокореляційна функція визначає динамічний структурний фактор (для достатньо високої температури або достатньо сильної випадковості), при високих температурах динамічний структурний фактор κ -незалежний і демонструє Гаусові піки (див. рівняння (1.16)). Це пов'язано з Гаусовим загасанням часової автокореляційної функції [229–232], яке відрізняється від повільного просторового загасання автокореляційної функції при низьких температурах.

Моделі спінових ланцюжків, які обговорюються тут, очевидно, мають досить особливий вигляд, і пошук строгих результатів для інших типів неоднорідності міжспінових взаємодій, де змінюються не лише знаки, а й їхні абсолютні значення є важливими. Проте, для загальніших моделей ці методи не застосовні, і повинні бути використані інші методи або наближення як, наприклад, у роботах [305, 308]. Розглянуті тут спеціальні моделі можуть бути корисні для тестування наближених методів застосовних до ширшого класу систем.

РОЗДІЛ 4

ФРУСТРОВАНІ КВАНТОВІ ДРАБИНКИ І ФЕРМІОНІЗАЦІЯ ЙОРДАНА-ВІГНЕРА

У цьому розділі досліджено основний стан одновимірних фрустрованих спінових моделей базуючись на перетворенні Йордана-Вігнера та подальшому наближенні Гартрі-Фока для ферміонізованого гамільтоніану (що відповідає наближенню середнього поля для ферміонних систем). У випадку спін-1/2 XXZ зигзаг драбинки [15] вивчено квантовий фазовий перехід до спонтанно димеризованої фази. При цьому, основний стан, енергія і статичний структурний фактор порівнюються з результатами точної діагоналізації: отримано добру згоду з числовими даними поблизу границі моделі Маджумдара-Гоша. Проаналізовано фазову діаграму основного стану в рамках теорії середнього поля. Зокрема, ми показуємо, що неспівмірний основний стан відсутній для великих значень взаємодії між наступними після найближчих сусідів при повністю самоузгодженому аналізі середнього поля.

У випадку спін-1/2 ромбічного ланцюжка аналізуються різні калібрувальні-інваріантні способи завдання спін-ферміонного перетворення [16, 17]. Доданки, які відповідають взаємодії у ферміонному гамільтоніані, розглядаються в межах процедури Гартрі-Фока після вибору відповідного калібрування. Ми досліджуємо магнітні властивості цієї моделі квантового спіну при нульовій, а також ненульовій температурах і аналізуємо достовірність використаного наближення, порівнюючи його з результатами методу точної діагоналізації для скінченних (до 36 спінів) ланцюжків.

Основні результати цього розділу викладені у роботах [15–17, 41, 43, 44, 46].

4.1. Основний стан спін-1/2 XXZ зигзаг драбинки: ферміонізація Йордана-Вігнера та наближення Гартрі-Фока

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

$$H = \sum_{l=1}^L J_1(s_l^x s_{l+1}^x + s_l^y s_{l+1}^y + \Delta s_l^z s_{l+1}^z) + J_2(s_l^x s_{l+2}^x + s_l^y s_{l+2}^y + \Delta s_l^z s_{l+2}^z), \quad (4.1)$$

де J_1 (J_2) > 0 — антиферромагнітні взаємодії між найближчими і наступними після найближчих сусідами, Δ — анізотропія обмінної взаємодії і s_l^α — спін-1/2 оператори. Після перетворення Йордана-Вігнера [215] спіновий гамільтоніан (4.1) зображається моделлю взаємодіючих безспінових ферміонів:

$$H = \sum_{l=1}^L \left(\frac{J_1}{2} c_l^+ c_{l+1} + \frac{J_2}{2} c_l^+ c_{l+2} - J_2 c_l^+ c_{l+1}^+ c_{l+1} c_{l+2} + h.c. \right) + \Delta J_1 \left(c_l^+ c_l - \frac{1}{2} \right) \left(c_{l+1}^+ c_{l+1} - \frac{1}{2} \right) + \Delta J_2 \left(c_l^+ c_l - \frac{1}{2} \right) \left(c_{l+2}^+ c_{l+2} - \frac{1}{2} \right). \quad (4.2)$$

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 середнього поля, де враховано всі парні кореляції типу $\langle c_n^+ c_m \rangle$ у факторизації таких доданків:

$$\begin{aligned} g_l &= \langle s_l^z \rangle = \langle c_l^+ c_l \rangle - \frac{1}{2}, \\ A_l &= \langle c_l^+ c_{l+1} \rangle = \langle c_{l+1}^+ c_l \rangle, \\ D_l &= \langle c_l^+ c_{l+2} \rangle = \langle c_{l+2}^+ c_l \rangle. \end{aligned} \quad (4.3)$$

Ці спарення пов'язані з одновузловими, сусідніми та наступними після найближчих сусідів спіновими кореляційними функціями. Далі проводимо самоузгоджене визначення цих спарень згідно статті [239], де, однак, було розглянуто лише випадок $g_l = D_l = 0$. Таким чином, розглядаємо усі можливі фази у цьому наближенні:

- і) парамагнітна (*homogeneous*) [235]: $A_l = A = -\frac{1}{\pi}$, $g_l = D_l = 0$

- 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 ($dimer$): $A_l = A + (-1)^l \delta$.

Самоузгоджені рівняння для фази iv) обговорюються нижче. 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.

Для випадку iv) після перетворення Фур'є середньопольовий гамільтоніан має такий вигляд

$$H = \sum_{-\pi < k \leq \pi} e_k c_k^+ c_k + \frac{if_k}{2} (c_{k\pm\pi}^+ c_k - c_k^+ c_{k\pm\pi}), \quad (4.4)$$

де $e_k = (J_1 - 2A(\Delta J_1 - 2J_2)) \cos(k)$, $f_k = 2\delta(\Delta J_1 + 2J_2) \sin(k)$. Його можна діагоналізувати за допомогою унітарного перетворення

$$\begin{aligned} c_k &= \frac{1+i}{\sqrt{2}} (\cos(\alpha_k^f/2) \eta_k - \sin(\alpha_k^f/2) \eta_{k\pm\pi}), \\ c_{k\pm\pi} &= \frac{1-i}{\sqrt{2}} (\sin(\alpha_k^f/2) \eta_k + \cos(\alpha_k^f/2) \eta_{k\pm\pi}), \end{aligned}$$

де $\cos \alpha_k^f = e_k / \sqrt{e_k^2 + f_k^2}$. Це призводить до моделі вільних ферміонів

$$H = \sum_{-\frac{\pi}{2} < k \leq \frac{\pi}{2}} \lambda_k (\eta_k^+ \eta_k - \eta_{k\pm\pi}^+ \eta_{k\pm\pi}) \quad (4.5)$$

з таким спектром $\lambda_k = \sqrt{e_k^2 + f_k^2}$. Параметри A , δ знаходимо з умов самоузгодження:

$$A = -\frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk \cos(k) \frac{e_k}{\sqrt{e_k^2 + f_k^2}},$$

$$\delta = \frac{1}{2\pi} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dk \sin(k) \frac{f_k}{\sqrt{e_k^2 + f_k^2}}. \quad (4.6)$$

Наближення середнього поля для енергії основного стану отримано з відповідних значень для ферміонного гамільтоніана (4.2), включаючи спарення лише до квадратичного порядку. Для фази димера $i\nu$) енергія основного стану на вузол має такий вигляд

$$e = J_1 A - (\Delta J_1 - 2J_2) A^2 - (\Delta J_1 + 2J_2) \delta^2. \quad (4.7)$$

Зазначимо, що параметр порядку димера [90] $d = \langle \vec{S}_{2i-1} \vec{S}_{2i} \rangle - \langle \vec{S}_{2i} \vec{S}_{2i+1} \rangle$ відповідає $4(A - 1)\delta$ у нашому наближенні.

Досі ми припускали, що самоузгоджені параметри в методі середнього поля дійсні. Проте, відомо, що анізотропія легкої площини $\Delta < 1$ індукує хіральну фазу для великих J_2 [95, 309]. Існування такої хіральної фази було раніше перевірено числовим методом в іншій моделі драбинки [310]. Параметр хірального порядку $\kappa_l = s_l^x s_{l+1}^y - s_l^y s_{l+1}^x$ відповідає уявній частині спарення ферміонів на найближчих вузлах $\Im m A_l$. Отже, для опису такого порядку потрібно припустити, що елементарне спарення є комплексним. Це змінює енергію основного стану:

$$e = J_1 A_R - (\Delta J_1 - 2J_2) A_R^2 - (\Delta J_1 + 2J_2) \delta_R^2 - (\Delta J_1 + 2J_2) A_I^2 - (\Delta J_1 - 2J_2) \delta_I^2, \quad (4.8)$$

де $A_{R(I)}$ — дійсна (уявна) частина A , і $\delta_{R(I)}$ — дійсна (уявна) частина δ . Очевидно, що для великих J_2/J_1 відмінне від нуля A_I знижує енергію основного стану на відміну від δ_I . Ми розглянули всі можливі розв'язки середнього поля з відмінними від нуля A_R , A_I і δ_R , проте виявили, що числовий розв'язок цих рівнянь не містить комплексних значень.

Модель Маджумдара-Гоша [92] $J_2 = J_1/2$ 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 окремий синглет. Це можна пов'язати з ферміонним представленням, нагадавши, що $S^z = +1/2(-1/2)$ на вузлі l відповідає заповненому (порожньому) вузлу l .

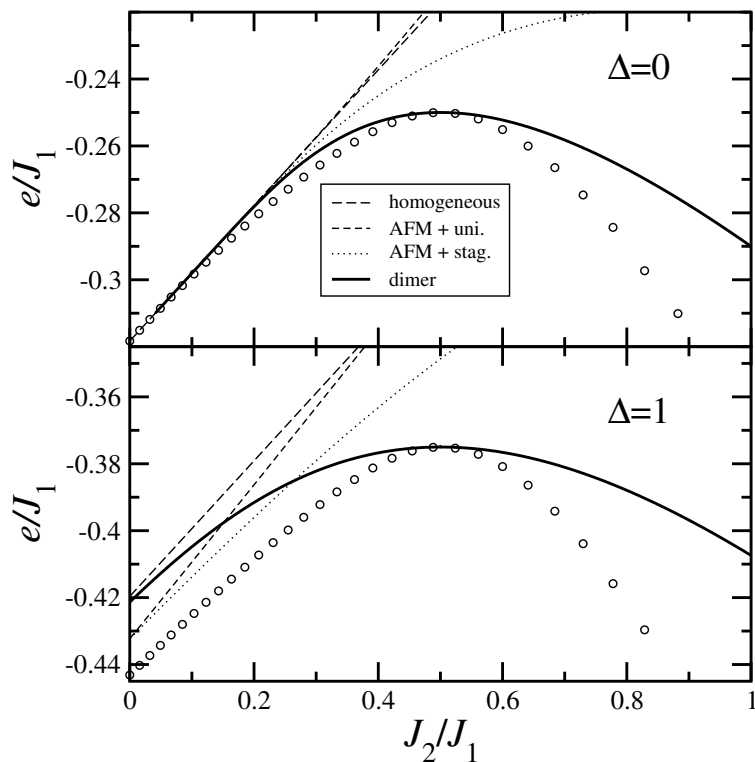


Рис. 4.1. Енергія основного стану на вузол як функція J_2/J_1 для $J_1 - J_2$ ХУ ланцюжка (верхня панель) і Гайзенберґового ланцюжка (нижня панель): кола — точна діагоналізація екстрапольована на безмежні системи; лінії відповідають різним середньопольовим розв'язкам для основного стану.

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) і вираз (4.6) дає $A = -1/4$, $\delta = \pm 1/4$. Підставляючи цей розв'язок в середньопольовий гамільтоніан, отримаємо:

$$H = \sum_{l=1}^{N/2} \frac{J_1(1 + \Delta)}{2} (\eta_l^{(t)+} \eta_l^{(t)} - \eta_l^{(s)+} \eta_l^{(s)}) + \frac{NJ_1\Delta}{8}, \quad (4.9)$$

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 (триplet) 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 $e = -J_1(2 + \Delta)/8$.

На рис. 4.1 показано результати числового розв'язку самоузгодженого рівняння для конфігурацій i)-iv). Можна переконатись, що всі розв'язки існують

для додатних J_2 . Щоб перевірити справедливість цих результатів, ми виконали точну діагоналізацію гамільтоніана (4.1) для $L \leq 32$ вузлів з подальшою екстраполяцією скінченного розміру за допомогою алгоритма Ванден-Брока-Шварца [311] для більшості випадків, $L = 12, 16, 32$. Екстрапольовані результати для енергії основного стану на вузол показано кружками на рис. 4.1. Помилки оцінюються як менші за розмір символів. Для $J_2 = 0$ наші екстрапольовані значення збігаються краще ніж $10^{-6} J_1$ з точними результатами [312] $e/J_1 = -1/\pi \approx -0.318310$ і $1/4 - \ln(2) \approx -0.443147$ для $\Delta = 0$ і 1 відповідно.

Окрім точного основного стану для моделі Маджумдара-Гоша, ми можемо порівняти розв'язок наближення середнього поля з іншими відомими результатами. Розпочнемо з XU моделі зі взаємодією лише найближчих сусідів ($\Delta = 0$, $J_2 = 0$), де перетворення Йордана-Вігнера допускає точний розв'язок [108, 312]. Для малих J_2/J_1 результати всіх самоузгоджених розв'язків дуже близькі (верхня панель рис. 4.1) і всі параметри порядку ростуть дуже повільно. Фактично, детальний аналіз (4.6) для A , δ показує, що $J_2 > J_{2,\text{dim}} = -\Delta J_1/2$ є умовою ненульового розв'язку для δ . Наближений розв'язок для невеликих $J_2 - J_{2,\text{dim}}$ вище цієї точки дає

$$\delta \approx \frac{a}{e(J_2 - J_{2,\text{dim}})} \exp\left(-\frac{\pi a}{4(J_2 - J_{2,\text{dim}})}\right), \quad (4.10)$$

де $a = J_1 - \frac{4}{\pi}(J_2 + J_{2,\text{dim}})$. Щілина у спектрі збуджень виникає при $k = \pi/2$ і зростає як $4(J_2 - J_{2,\text{dim}})\delta$. Зауважимо, що близько до критичної точки J_{2c} результат підходу бозонізації має схожу форму [89, 90] $\delta \sim \exp\left(-\frac{\text{const} J_1}{(J_2 - J_{2c})}\right)$ і щілину, яка пропорційна до δ^2 .

Для отримання фазової діаграми порівнюються енергії основного стану всіх фаз. У режимі слабкої фрустрації, розв'язок “*AFM+stag.*” має найменшу енергію і в певний момент $\alpha_c = J_{2c}/J_1$ перетинається з розв'язком для димерної фази (див. рис. 4.1 для $\Delta = 1$). Це можна ототожнити з фазовим переходом першого роду. Зауважте, що при $\Delta = 1$ “*AFM+uni.*” і димерний розв'язок перетинаються дуже близько до числової оцінки критичної точки [89] $J_2 = J_1/6$. Врахування розв'язку “*AFM+stag.*” зміщує точку перетину, що забезпечує добру згоду з числовими ре-

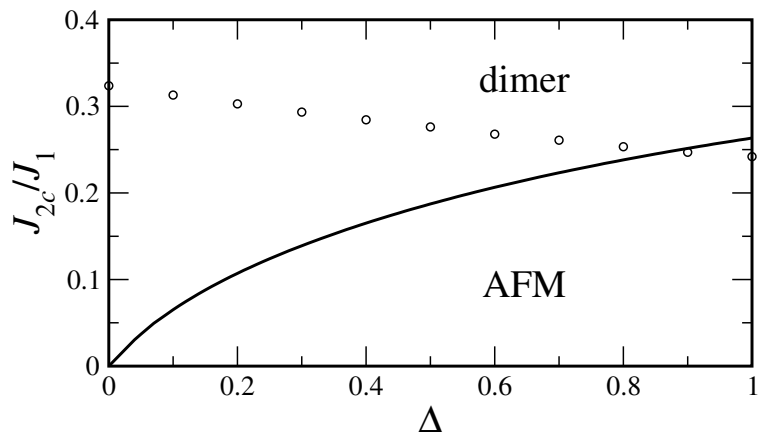


Рис. 4.2. Фазова діаграма для $J_1 - J_2$ XXZ ланцюжка як функція анізотропії Δ : суцільна лінія — результат наближення середнього поля, кола — результат точної діагоналізації [275].

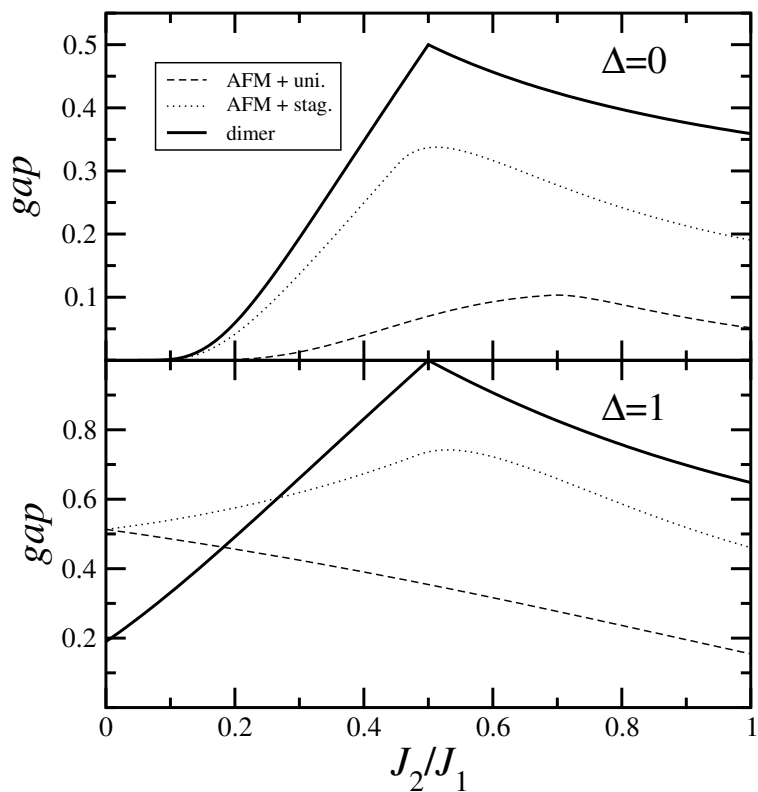


Рис. 4.3. Щілина у спектрі збуджень середньопольового гамільтоніану як функція J_2/J_1 для $J_1 - J_2$ XY ланцюжка (верхня панель) і Гайзенберґового ланцюжка (нижня панель).

зультатами [91] $J_{2c} \approx 0.242J_1$ для $\Delta = 1$. На рис. 4.2 ця точка перетину показана як функція анізотропії Δ . Хоча критичне значення J_2 дуже близьке до числових результатів для $\Delta \approx 1$, положення точки перетину зменшується зі зменшенням Δ , тоді як дані точної діагоналізації [93, 275] виявляють збільшення J_{2c} .

Щілини у спектрі збуджень для різних розв'язків середнього поля зображено на рис. 4.3. Розв'язок “*uniform*” завжди безщілинний і не відображається тут. Розв'язок “*dimer*” і “*AFM+stag.*” має максимум щілини біля точки Маджумдара-Гоша, що узгоджується з числовими даними [90]. Положення мінімуму в спектрі збудження розв'язку “*dimer*” переходить від $k = \pm\pi/2$ до $k = 0$ на точці Маджумдара-Гоша. Мінімум розв'язку “*AFM+stag.*” зміщується безперервно для $J_2 > J_1/2$.

Статичний структурний фактор $S^{zz}(q) = \sum_{l=1}^L \exp(iql) \langle s_n^z s_{n+l}^z \rangle$ можна виразити через чотириферміонну кореляційну функцію. Для стану димера ми отримуємо такий результат у середньопольовому наближенні:

$$S^{zz}(q) = \frac{1}{4} - \frac{1}{4\pi} \int_0^\pi dk \frac{e_k e_{k+q} + f_k f_{k+q}}{\sqrt{(e_k^2 + f_k^2)(e_{k+q}^2 + f_{k+q}^2)}}. \quad (4.11)$$

У границі моделі Маджумдара-Гоша відтворюється точний результат $S^{zz}(q) = \frac{1}{4}(1 - \cos(q))$ [94]. Результат (4.11) для zz статичного структурного фактора при $J_2/J_1 = 5/11$ показано на рис. 4.4 суцільною лінією у порівнянні з числовими результатами (відкриті символи). Обидва підходи дають широкий максимум на межі зони Брилюена $q = \pm\pi$, що означає антиферромагнітні кореляції з короткою кореляційною довжиною [90, 94]. Невеликі відхилення спостерігаються при $q = \pm\pi$, де числове значення сильно залежить від розміру системи.

4.2. Магнітні властивості спін-1/2 XX ромбічного ланцюжка

Іншим прикладом фрустрованої моделі з основним станом на основі синглетних димерів є спін-1/2 XXZ модель Гайзенберга на ромбічному ланцюжку (див. рис. 4.5). Як було зазначено у розділі 1, 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. 4.5, з таким

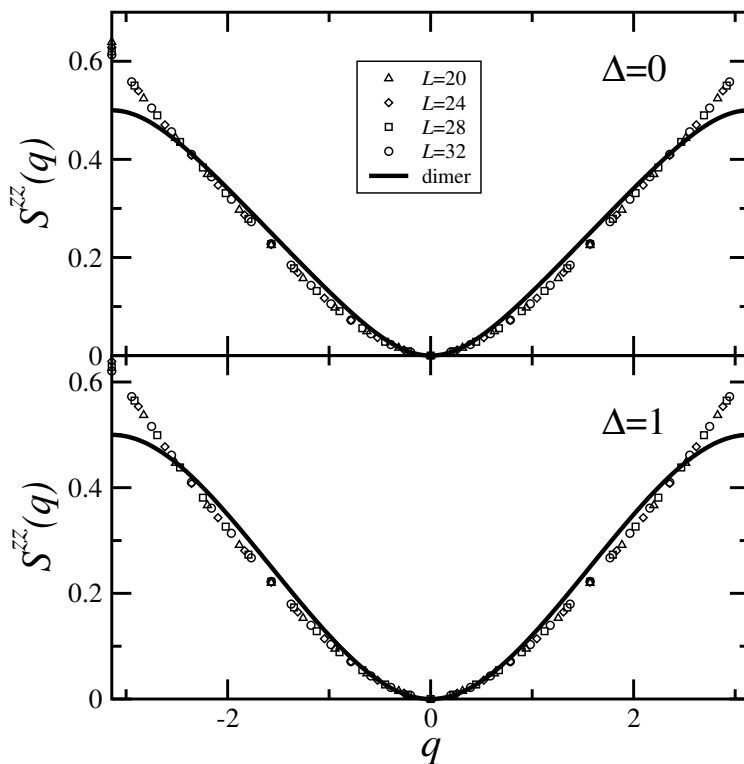


Рис. 4.4. Структурний фактор $S^{zz}(q)$ як функція q для $J_1 - J_2$ ХУ ланцюжка (верхня панель) і Гайзенберґового ланцюжка (нижня панель) при $J_2 = 5J_1/11$. Лінія — результат середньопольового розв'язку для димерної фази; символи — дані точної діагоналізації для систем різних розмірів від 20 до 32 вузлів.

гамільтоніаном:

$$\begin{aligned}
 H_{xx} = & \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[(J_2 s_{2,l}^+ s_{3,l}^- + J_1 (s_{1,l}^+ s_{2,l}^- + s_{3,l}^+ s_{1,l+1}^-) \right. \\
 & \left. + J_3 (s_{1,l}^+ s_{3,l}^- + s_{2,l}^+ s_{1,l+1}^-) + \text{h.c.}) - 2h \sum_{p=1}^3 \left(s_{p,l}^+ s_{p,l}^- - \frac{1}{2} \right) \right], \quad (4.12)
 \end{aligned}$$

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 спінів-1/2 операторів перший індекс якого відповідає підґратці, 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.

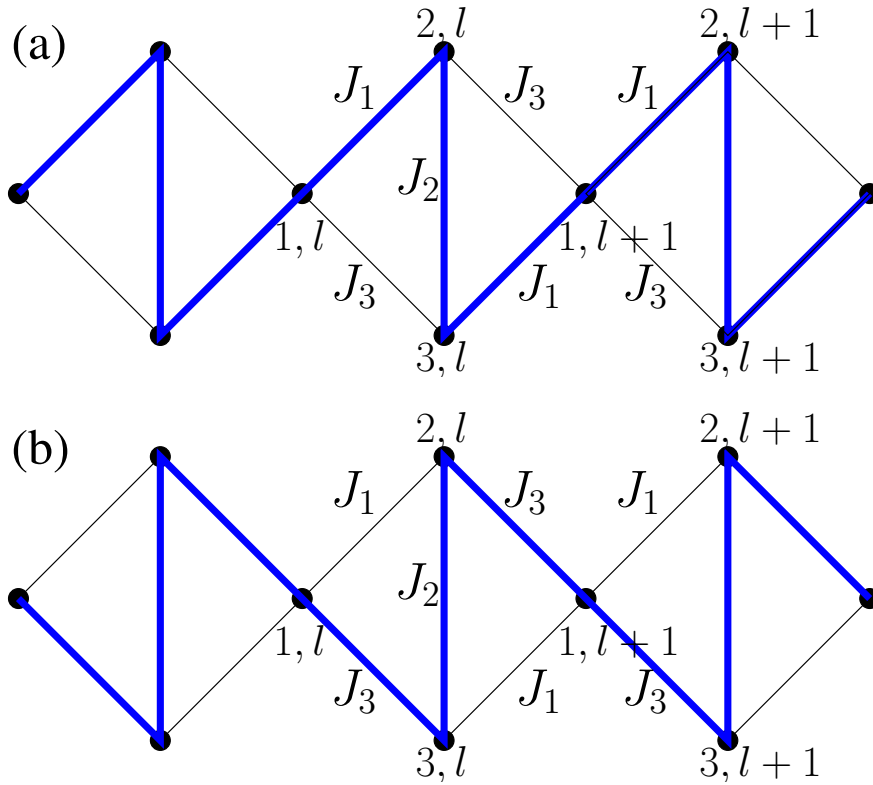


Рис. 4.5. Різні способи задати перетворення Йордана-Вігнера на ромбічному ланцюжку виділені товстими лініями. Випадок **i)** (панель а) і випадок **ii)** (панель b), див. основний текст.

4.2.1. Різні способи ферміонізації для спін-1/2 XX ромбічного ланцюжка

Перетворення Йордана-Вігнера можна однозначно визначити на лінійному ланцюжку [108, 216], 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. 4.5. 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, яке вводить нові оператори Фермі шляхом множення операторів опускання та піднімання спіна на множники Йордана-Вігнера $(-2s_{l,m}^z)$

по відношенню до всіх попередніх спінів [108, 216]. Для випадку **i)** маємо:

$$\begin{aligned}
s_{1,l}^- &= a_{1,l} \exp \left[-i\pi \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} a_{p,i}^+ a_{p,i} \right], \\
s_{2,l}^- &= a_{2,l} \exp \left[-i\pi \left(a_{1,l}^+ a_{1,l} + \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} a_{p,i}^+ a_{p,i} \right) \right], \\
s_{3,l}^- &= a_{3,l} \exp \left[-i\pi \left(a_{1,l}^+ a_{1,l} + a_{2,l}^+ a_{2,l} + \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} a_{p,i}^+ a_{p,i} \right) \right], \\
s_{n,l}^z &= s_{n,l}^+ s_{n,l}^- - \frac{1}{2} = a_{n,l}^+ a_{n,l} - \frac{1}{2}.
\end{aligned} \tag{4.13}$$

Доданки спінової взаємодії, які з'являються в гамільтоніані (4.12), також можна переписати за допомогою рівнянь (4.13) у ферміонному представленні: $s_{1,l}^+ s_{2,l}^- = a_{1,l}^+ a_{2,l}$, $s_{2,l}^+ s_{3,l}^- = a_{2,l}^+ a_{3,l}$, $s_{1,l}^+ s_{3,l}^- = a_{1,l}^+ e^{i\pi a_{2,l}^+ a_{2,l}} a_{3,l}$, $s_{2,l}^+ s_{1,l+1}^- = a_{2,l}^+ e^{i\pi a_{3,l}^+ a_{3,l}} a_{1,l+1}$, $s_{3,l}^+ s_{1,l+1}^- = a_{3,l}^+ a_{1,l+1}$. Звідси випливає, що ферміонне представлення гамільтоніана спін-1/2 XX ромбічного ланцюжка записується у такій формі:

$$\begin{aligned}
H_{xx} &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[(J_2 a_{2,l}^+ a_{3,l} + J_1 (a_{1,l}^+ a_{2,l} + a_{3,l}^+ a_{1,l+1}) \right. \\
&\quad \left. + J_3 (a_{1,l}^+ e^{i\pi a_{2,l}^+ a_{2,l}} a_{3,l} + a_{2,l}^+ e^{i\pi a_{3,l}^+ a_{3,l}} a_{1,l+1}) + \text{h.c.} \right) - 2h \sum_{p=1}^3 \left(a_{p,l}^+ a_{p,l} - \frac{1}{2} \right) \right] \tag{4.14}
\end{aligned}$$

У такій нумерації $(1, l)$, $(3, l)$ і $(2, l)$, $(1, l+1)$ не є найближчими сусідами. Отже, відповідні взаємодії містять фазові множники в термінах перескоків, які додають ферміонну взаємодію до моделі, і руйнують її інтегровність. Наклавши періодичні граничні умови у розглянутій моделі, $s_{N,l}^\pm s_{1,m}^\mp$ трансформуються у багатоферміонні доданки. Такими граничними умовами можна знехтувати після виконання перетворення Йордана-Вігнера, оскільки вони не впливають на статичні властивості у термодинамічній границі [108, 216].

Розглядаючи впорядкування вузлів **ii)**, перетворення Йордана-Вігнера слід задавати таким чином:

$$s_{1,l}^- = \tilde{a}_{1,l} \exp \left[-i\pi \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{a}_{p,i}^+ \tilde{a}_{p,i} \right],$$

$$\begin{aligned}
s_{2,l}^- &= \tilde{a}_{2,l} \exp \left[-i\pi \left(\tilde{a}_{1,l}^+ \tilde{a}_{1,l} + \tilde{a}_{3,l}^+ \tilde{a}_{3,l} + \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{a}_{p,i}^+ \tilde{a}_{p,i} \right) \right], \\
s_{3,l}^- &= \tilde{a}_{3,l} \exp \left[-i\pi \left(\tilde{a}_{1,l}^+ \tilde{a}_{1,l} + \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} \tilde{a}_{p,i}^+ \tilde{a}_{p,i} \right) \right].
\end{aligned} \tag{4.15}$$

Отже, отримуємо інше ферміонне представлення спінового гамільтоніану (4.12):

$$\begin{aligned}
H_{xx} &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[(J_2 \tilde{a}_{2,l}^+ \tilde{a}_{3,l} + J_3 (\tilde{a}_{1,l}^+ \tilde{a}_{3,l} + \tilde{a}_{2,l}^+ \tilde{a}_{1,l+1}) \right. \\
&\quad \left. + J_1 (\tilde{a}_{1,l}^+ e^{i\pi \tilde{a}_{3,l}^+ \tilde{a}_{3,l}} \tilde{a}_{2,l} + \tilde{a}_{3,l}^+ e^{i\pi \tilde{a}_{2,l}^+ \tilde{a}_{2,l}} \tilde{a}_{1,l+1}) + \text{h.c.}) - 2h \sum_{p=1}^3 \left(\tilde{a}_{p,l}^+ \tilde{a}_{p,l} - \frac{1}{2} \right) \right]. \tag{4.16}
\end{aligned}$$

Гамільтоніан (4.16) відрізняється від попередньо ферміонізованої форми (4.14): ферміонні перескоки, які не містили ферміонної взаємодії раніше, тепер набули фазових множників, і навпаки. Спільною рисою обох гамільтоніанів є те, що вони містять взаємодію лише в окремих членах, і тому вклади різних взаємодій уже не розглядатимуться однаковим чином.

Використовуючи (4.13), (4.15), можна знайти зв'язок операторів $a_{p,m}$ і $\tilde{a}_{p,m}$ через калібрувальне перетворення:

$$\begin{aligned}
a_{1,l} &= \tilde{a}_{1,l}, \\
a_{2,l} &= \tilde{a}_{2,l} \exp(i\pi \tilde{a}_{3,l}^+ \tilde{a}_{3,l}), \quad \tilde{a}_{2,l} = a_{2,l} \exp(i\pi a_{3,l}^+ a_{3,l}), \\
a_{3,l} &= \tilde{a}_{3,l} \exp(i\pi \tilde{a}_{2,l}^+ \tilde{a}_{2,l}), \quad \tilde{a}_{3,l} = a_{3,l} \exp(i\pi a_{2,l}^+ a_{2,l}).
\end{aligned} \tag{4.17}$$

А отже, гамільтоніани (4.14) і (4.16) описують ідентичну фізичну систему. Очевидно, що можна отримати і загальніше калібрувальне перетворення для фермі-операторів c_x :

$$\tilde{c}_x = e^{i \sum_{y \neq x} \alpha_{xy} n_y} c_x, \tag{4.18}$$

де x, y — загальні індекси, які можуть включати індекси комірок і підґраток. Якщо $\alpha_{xy} = \alpha_{yx} + 2\pi n$, нові оператори \tilde{c}_x задовольняють комутаційним співвідношенням Фермі.

Зафіксувавши калібрування у перетворенні (4.18), розгляньмо частковий випадок:

$$\begin{aligned} c_{1,l} &= a_{1,l}, \\ c_{2,l} &= e^{i\frac{\pi}{2}a_{3,l}^+} a_{2,l}, \quad a_{2,l} = e^{-i\frac{\pi}{2}c_{3,l}^+} c_{2,l}, \\ c_{3,l} &= e^{i\frac{\pi}{2}a_{2,l}^+} a_{3,l}, \quad a_{3,l} = e^{-i\frac{\pi}{2}c_{2,l}^+} c_{3,l}. \end{aligned} \quad (4.19)$$

Це дає ферміонізований гамільтоніан у найбільш симетричній формі:

$$\begin{aligned} H_{xx} &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[(J_1(c_{1,l}^+ e^{-i\frac{\pi}{2}c_{3,l}^+} c_{2,l} + c_{3,l}^+ e^{i\frac{\pi}{2}c_{2,l}^+} c_{1,l+1}) \right. \\ &\quad \left. + J_3(c_{1,l}^+ e^{i\frac{\pi}{2}c_{2,l}^+} c_{3,l} + c_{2,l}^+ e^{-i\frac{\pi}{2}c_{3,l}^+} c_{1,l+1}) + J_2 c_{2,l}^+ c_{3,l} + \text{h.c.}) - 2h \sum_{p=1}^3 \left(c_{p,l}^+ c_{p,l} - \frac{1}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.20)$$

Також можна легко знайти спін-ферміонне перетворення, що веде до представлення (4.19):

$$\begin{aligned} s_{1,l}^- &= c_{1,l} \exp \left[-i\pi \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} c_{p,i}^+ c_{p,i} \right], \\ s_{2,l}^- &= c_{2,l} \exp \left[-i\pi \left(\frac{1}{2} c_{3,l}^+ c_{3,l} + c_{1,l}^+ c_{1,l} + \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} c_{p,i}^+ c_{p,i} \right) \right], \\ s_{3,l}^- &= c_{3,l} \exp \left[-i\pi \left(-\frac{1}{2} c_{2,l}^+ c_{2,l} + c_{1,l}^+ c_{1,l} + \sum_{p=1}^3 \sum_{i=1}^{l-1} c_{p,i}^+ c_{p,i} \right) \right]. \end{aligned} \quad (4.21)$$

Отже, рівняння (4.21) представляють загальніше формулювання перетворення Йордана-Вігнера для спінових драбинок:

$$s_x^+ = c_x^+ e^{i\pi\phi_x}, \quad \phi_x = \sum_{y \neq x} \varphi_{x,y} c_y^+ c_y \quad (4.22)$$

з умовою $\varphi_{x,y} = \varphi_{y,x} \pm 1$ [238]. Тут x, y — такі ж загальні індекси, як і було наведено вище.

Звернемо увагу також на деякі граничні випадки моделі. Якщо $J_1 = 0$ або $J_3 = 0$, модель перетворюється у точно розв'язний ХХ тримеризований ланцюжок [313–315]. Дійсно, якщо $J_3 = 0$ (або $J_1 = 0$), після перетворення Йордана-Вігнера (4.13) (або (4.15)) ми отримуємо гамільтоніан (4.14) (або (4.16)) у вигляді

вільних ферміонів. Якщо $J_2 = 0$, але $J_1 \neq 0$, $J_3 \neq 0$, неможливо знайти таку форму перетворення Йордана-Вігнера, що дозволяє уникнути взаємодії між ферміонами в перетвореному гамільтоніані. Тому розгляд моделей з $J_1 \neq 0$, $J_3 \neq 0$ вимагає подальших наближень, навіть якщо $J_2 = 0$.

Для подальшого розгляду корисно нагадати, що спіновий стан $|\downarrow\rangle_n$ ($|\uparrow\rangle_n$) відповідає порожньому $|0\rangle_n$ (заповненому $|1\rangle_n = c_n^+|0\rangle_n$) ферміонному стану. Таким чином, намагніченість на спін у z -напрямку пов'язана з ферміонними середніми у такий спосіб:

$$m_z = \frac{1}{3N} \sum_{p=1}^3 \sum_{l=1}^N \langle s_{p,l}^z \rangle = \frac{1}{3N} \sum_{p=1}^3 \sum_{l=1}^N \langle c_{p,l}^+ c_{p,l} \rangle - \frac{1}{2}. \quad (4.23)$$

4.2.2. Наближення Гартрі-Фока для дисторсного ромбічного ланцюжка

Якщо вузли $(2, l)$ і $(3, l)$ зміщуються зі своїх симетричних позицій, приходимо до дисторсного ромбічного ланцюжка, де лише деякі спінові взаємодії відрізняються один від одного. Без втрати загальності можна накласти $J_1 > J_3$ і вибрати таке ферміонне представлення гамільтоніана (4.14), де взаємодії між ферміонами з'являються лише вздовж слабших зв'язків. Останні доданки розглядаються пертурбативно. Використовуючи алгебру операторів Фермі, тобто $\exp(i\pi a_{p,l}^+ a_{p,l}) = 1 - 2a_{p,l}^+ a_{p,l}$, можна переписати (4.14) у такій формі:

$$\begin{aligned} H_{xx} = & \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[(J_2 a_{2,l}^+ a_{3,l} + J_1 (a_{1,l}^+ a_{2,l} + a_{3,l}^+ a_{1,l+1}) + J_3 (a_{1,l}^+ (1 - 2a_{2,l}^+ a_{2,l}) a_{3,l} \right. \\ & \left. + a_{2,l}^+ (1 - 2a_{3,l}^+ a_{3,l}) a_{1,l+1}) + \text{h.c.} \right] - 2h \sum_{p=1}^3 \left(a_{p,l}^+ a_{p,l} - \frac{1}{2} \right). \quad (4.24) \end{aligned}$$

Застосувавши наближення Гартрі-Фока або середнього поля [226, 236, 316], який зберігає кореляції між сусідніми вузлами, наприклад,

$$a_{1,l}^+ a_{3,l}^+ a_{3,l} a_{2,l} \approx -a_{1,l}^+ a_{3,l} A_1 - A_3 a_{3,l}^+ a_{2,l} + A_3 A_1 + a_{1,l}^+ a_{2,l} \bar{n}_2 + A_2 a_{3,l}^+ a_{3,l} - A_2 \bar{n}_2, \quad (4.25)$$

приходимо до квадратичної форми за фермі-операторами:

$$\begin{aligned}
H_{xx} \approx & \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[((J_2 + 4J_3A_2)a_{2,l}^+a_{3,l} + (J_1 + 2J_3A_1)(a_{1,l}^+a_{2,l} + a_{3,l}^+a_{1,l+1}) \right. \\
& + J_3(1 - 2\bar{n}_2)(a_{1,l}^+a_{3,l} + a_{2,l}^+a_{1,l+1}) + \text{h.c.}) - 2ha_{1,l}^+a_{1,l} \\
& \left. - 2(h + J_3A_3)(a_{2,l}^+a_{2,l} + a_{3,l}^+a_{3,l}) \right] + Ne_0. \tag{4.26}
\end{aligned}$$

Тут введено нові позначення: $A_1 = \langle a_{2,l}^+a_{3,l} \rangle$, $A_2 = \langle a_{1,l}^+a_{2,l} \rangle = \langle a_{3,l}^+a_{1,l+1} \rangle$, $A_3 = \langle a_{1,l}^+a_{3,l} \rangle = \langle a_{2,l}^+a_{1,l+1} \rangle$, $\bar{n}_2 = \langle a_{2,l}^+a_{2,l} \rangle = \langle a_{3,l}^+a_{3,l} \rangle$, $e_0 = \frac{3h}{2} - 4J_3A_1A_2 + 4J_3\bar{n}_2A_3$. В елементарних спареннях A_2 , A_3 використано інваріантність початкового гамільтоніану відносно просторової інверсії.

Після перетворення Фур'є,

$$\begin{aligned}
a_{p,\kappa} &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{l=1}^N e^{-il\kappa} a_{p,l}, \quad a_{p,l} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\kappa} e^{il\kappa} a_{p,\kappa}, \\
\kappa &= 2\pi m/N, \quad m = -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} \text{ (для парних } N), \\
m &= -\frac{N-1}{2}, \dots, \frac{N-1}{2} \text{ (для непарних } N),
\end{aligned}$$

гамільтоніан можна представити у матричній формі

$$\begin{aligned}
H_{xx} &= \sum_{\kappa} \sum_{p,q=1}^3 \mathcal{H}_{p,q}(\kappa) a_{p,\kappa}^+ a_{q,\kappa} + Ne_0, \tag{4.27} \\
\mathcal{H}_{11}(\kappa) &= -h, \quad \mathcal{H}_{22}(\kappa) = \mathcal{H}_{33}(\kappa) = -h - 2A_3J_3, \\
\mathcal{H}_{12}(\kappa) &= \mathcal{H}_{21}^*(\kappa) = \frac{1}{2}(J_1 + 2J_3A_1 + J_3(1 - 2\bar{n}_2)e^{-i\kappa}), \\
\mathcal{H}_{13}(\kappa) &= \mathcal{H}_{31}^*(\kappa) = \frac{1}{2}(J_3(1 - 2\bar{n}_2) + (J_1 + 2J_3A_1)e^{-i\kappa}), \\
\mathcal{H}_{23}(\kappa) &= \mathcal{H}_{32}(\kappa) = \frac{1}{2}(J_2 + 4A_2J_3),
\end{aligned}$$

та звести до діагональної форми:

$$H_{xx} = \sum_{p,\kappa} \Lambda_p(\kappa) \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} + Ne_0 \tag{4.28}$$

за допомогою унітарного перетворення $\eta_{p,\kappa} = \sum_{q=1}^3 u_{p,q}(\kappa) a_{q,\kappa}$ де $u_{p,q}(\kappa)$ — унітарна матриця. Загалом, це відповідає задачі на пошук власних значень та власних

векторів 3×3 матриці. В результаті, модель наближено представляється як вільний ферміонний газ і його термодинамічні та кореляційні функції можна легко обчислити. Проте елементарні спарення, які входять до параметрів гамільтоніана, невідомі і їх потрібно знайти самоузгоджено:

$$\begin{aligned}
\bar{n}_2 &= \langle a_{2,l}^+ a_{2,l} \rangle = \sum_{\kappa} \sum_p |u_{2,p}(\kappa)|^2 \langle \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} \rangle, \\
A_1 &= \langle a_{2,l}^+ a_{3,l} \rangle = \sum_{\kappa} \sum_p u_{2,p}^*(\kappa) u_{3,p}(\kappa) \langle \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} \rangle, \\
A_2 &= \langle a_{1,l}^+ a_{2,l} \rangle = \sum_{\kappa} \sum_p u_{1,p}^*(\kappa) u_{2,p}(\kappa) \langle \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} \rangle, \\
A_3 &= \langle a_{1,l}^+ a_{3,l} \rangle = \sum_{\kappa} \sum_p u_{1,p}^*(\kappa) u_{3,p}(\kappa) \langle \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} \rangle.
\end{aligned} \tag{4.29}$$

Тут $\langle \dots \rangle$ позначає термодинамічне середнє гамільтоніану (4.28), а для ідеального газу Фермі $\langle \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} \rangle = 1/(\exp(\beta\Lambda_p(\kappa))+1)$ — функція Фермі-Дірака. Таким чином, початкова задача статистичної механіки для спінової моделі перетворюється на розв'язок системи рівнянь (4.29). Ми розв'язали рівняння чисельно, а потім використали формули для вільного ферміонного газу розрахувати термодинаміку та статичні властивості моделі. Зокрема, рівняння (4.23) можна використовувати для розрахунку повної намагніченості.

Для $T = 0$ $\langle \eta_{p,\kappa}^+ \eta_{p,\kappa} \rangle$ стає сходяючою функцією Гевісайда і підсумовування в (4.29) обмежується тими значеннями κ , які задовольняють $\Lambda_p(\kappa) \leq 0$. Це спрощує розрахунок характеристик основного стану моделі. Результати для намагніченості основного стану показані на рис. 4.6. Варто зауважити що точний результат відтворюється для однорідного [108, 216] і тримеризованого [314, 315] спін-1/2 ХХ ланцюжка в окремих випадках $J_1 = J_2 = 1, J_3 = 0$ і $J_1 = 1, J_2 = 2, J_3 = 0$, як це показано на рис. 4.6. Іншим окремим випадком, який піддається точному розрахунку, є границя димер-мономерної фази $J_2 = 2, J_1 = J_3 = 1$ (див. рис. 4.6b). Намагніченість тут має східчасту форму, а рівняння Гартрі-Фока (4.29) — такі розв'язки для елементарних спарень: $\bar{n}_2 = \frac{1}{2}, A_1 = -\frac{1}{2}, A_2 = A_3 = 0$ для $h < \frac{J_2}{2}$. Підставляючи отримані розв'язки для $J_2 = 2, J_1 = J_3 = 1$ в рівнян-

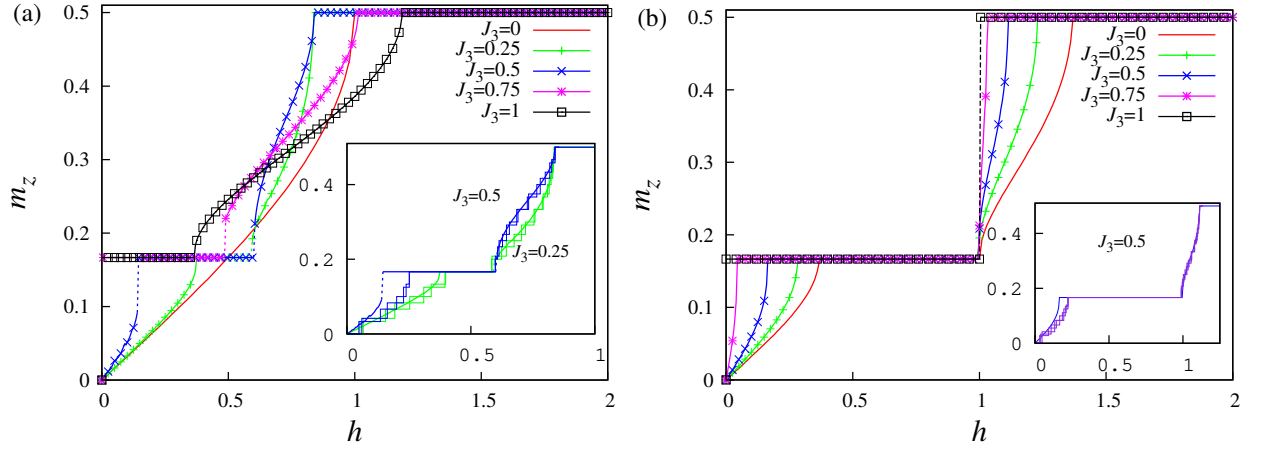


Рис. 4.6. Намагніченість в основному стані як функція зовнішнього поля для дисторсного ромбічного ланцюжка: $J_1 = 1$, $J_3 = 0, 0.25, 0.5, 0.75, 1$. (a) $J_2 = 1$. У вкладці наведено результати наближення Гартрі-Фока і точної діагоналізації для $N = 24, 30, 36$ (сходиноподібні лінії) для $J_3 = 0.25, 0.5$. b) $J_2 = 2$. Вкладка демонструє порівняння результатів наближення Гартрі-Фока і точної діагоналізації для $N = 24, 30, 36$ (сходиноподібні лінії) для $J_3 = 0.5$.

ня (4.26), приходимо до наближеного гамільтоніану у формі:

$$H_{xx} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[J_2 (c_{2,l}^+ c_{3,l} + c_{3,l}^+ c_{2,l}) - 2h \left(c_{1,l}^+ c_{1,l} + c_{2,l}^+ c_{2,l} + c_{3,l}^+ c_{3,l} - \frac{3}{2} \right) \right]. \quad (4.30)$$

Його можна діагоналізувати унітарним перетворенням: $\eta_{s,l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{2,l} - c_{3,l})$, $\eta_{t,l} = \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{2,l} + c_{3,l})$, $\eta_{m,l} = c_{1,l}$, в результаті якого отримуємо

$$H_{xx} = \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N \left[J_2 (\eta_{t,l}^+ \eta_{t,l} - \eta_{s,l}^+ \eta_{s,l}) - 2h \left(\eta_{t,l}^+ \eta_{t,l} + \eta_{s,l}^+ \eta_{s,l} + \eta_{m,l}^+ \eta_{m,l} - \frac{3}{2} \right) \right]. \quad (4.31)$$

Її основний стан можна легко знайти в такому вигляді: $|GS\rangle = \prod_l \frac{1}{\sqrt{2}}(c_{2,l}^+ - c_{3,l}^+) |0\rangle = \prod_l |\downarrow\rangle_{1,l} [2, l; 3, l]$, якщо $h < 0$, $|GS\rangle = \prod_l \frac{1}{\sqrt{2}} c_{1,l}^+ (c_{2,l}^+ - c_{3,l}^+) |0\rangle = \prod_l |\uparrow\rangle_{1,l} [2, l; 3, l]$, якщо $h > 0$. Тут $[2, l; 3, l]$ представляє стан синглетного димера між спінами на вузлах $(2, l)$ і $(3, l)$. Очевидно, що гамільтоніан (4.31) справді представляє модель нескорельованих синглетних димерів, створених між спінами на вузлах $(2, l)$ і $(3, l)$, які розділені через вільні мономерні спіни, що знаходяться на вузлах $(1, l)$, і, таким чином, кореляції між синглетними димерами відсутні.

Для проміжних значень J_3 можна отримати лише наближені результати. Щоб зрозуміти, наскільки добре розроблений підхід працює, порівняємо його з результатами точної діагоналізації скінченних ланцюжків до 36 спінів, зображених на вставках до рис. 4.6. Наближені результати досить точні для достатньо сильних полів h , і відтворюють плато $1/3$ для ромбічних ланцюжків. Тому метод Гартрі-Фока можна вважати надійним навіть у випадку сильної фрустрації ($J_3 \sim J_1$). Однак для малого поля підхід Гартрі-Фока може викликати штучний стрибок намагніченості для $J_3 = 0.25, 0.5, 0.75$, якщо порівняти його результати з даними методу точної числової діагоналізації (див. рис. 4.6(a)).

Плато $1/3$ на кривій намагніченості можна зрозуміти з формули (4.23) як інтеграл густини станів. Наближене представлення оригінальної спінової моделі (4.12) є ферміонною моделлю з трьома типами ферміонів. Таким чином, енергетичний спектр складається з трьох смуг, розділених щілинами. Зовнішнє поле відіграє роль хімічного потенціалу ферміонів, який може змістити їхній рівень Фермі в область між двома зонами. Така ситуація відповідає $1/3$ -плато намагніченості. Очевидно, що всі елементарні спарення не змінюються уздовж плато. Отже, ширина плато дорівнює величині щілини, якщо крива намагніченості не виявляє стрибків.

Вплив взаємодії J_3 на процес намагнічення в основному стані легко зрозуміти з рис. 4.7. Бачимо, що для початково однорідного ланцюжка ($J_2 = J_1 = 1$) додавання фрустрованої взаємодії J_3 зазвичай спричиняє появу проміжного плато намагніченості при $m = 1/3$, яке стає тим ширшим, чим сильнішою є взаємодія J_3 (див. рис. 4.7а). Як правило, взаємодія J_3 збільшує ширину плато намагніченості також у випадку початкового тримеризованого ланцюжка. Цікаво відзначити, що верхнє критичне поле для $1/3$ -плато намагніченості у випадку $J_1 = 1, J_2 = 2$ не демонструє помітної залежності від J_3 .

Слід зазначити, що фазова діаграма основного стану анізотропного дисторсного ромбічного ланцюжка була досліджена раніше [106, 317, 318]. У цій загальнішій моделі можна знайти так звані області інверсії, де фаза Нееля стає основним станом у просторі параметрів з переважною XU частиною взаємодії, а фаза спі-

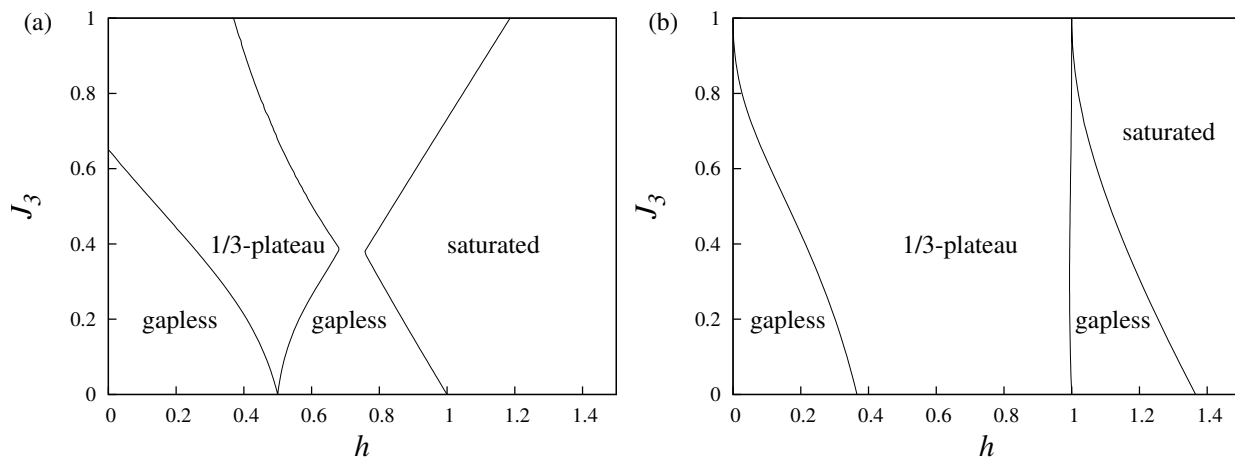


Рис. 4.7. Фазова діаграма основного стану дисторсного ромбічного ланцюжка в наближенні Гартрі-Фока. Ліва (права) панель відповідає випадку $J_1 = 1$, $J_2 = 1$ ($J_1 = 1$, $J_2 = 2$).

нової рідини навпаки з'являється в області параметрів з переважною Ізинговою взаємодією. Порядок Нееля, розглянутий у роботах [106, 317, 318] пов'язаний з антиферромагнітним упорядкуванням спінових блоків ($\mathbf{s}_{3,l-1} + \mathbf{s}_{1,l} + \mathbf{s}_{2,l}$), і таким чином відповідає 6 спінам в магнітній комірці. Здається, ця фаза зникає в чистій границі XY моделі (див. рис. 2 статті [318]), принаймні це вірно для $J_1 \gg J_2, J_3$. Оскільки, ми не розглядали можливість подвоєння елементарної магнітної комірки в нашому підході, ми не можемо перевірити, чи існує така фаза. Крім того, фаза спінової рідини, знайдена в роботі [318] для $h = 0$ не відтворюється в нашому підході, що можна віднести до недоліків його середньопольового характеру.

4.2.3. Наближення Гартрі-Фока для симетричного ромбічного ланцюжка

Далі розглянемо випадок симетричного ромбічного ланцюжка, коли взаємодії вздовж сторін ромба однакові $J_1 = J_3$. Для цього скористаємось ферміонним представленням (4.20) спінового гамільтоніана, який є симетричним відносно цих зв'язків. У ферміонному гамільтоніані при розщепленні зберігаємо всі члени, які відповідають кореляціям між сусідніми вузлами. Оскільки коефіцієнти гамільтоніана (4.20) є комплексними, елементарні спарення також можуть набу-

вати комплексних значень. Подібно до попереднього підрозділу вводимо наступні позначення:

$$\begin{aligned} A_1 &= \langle c_{2,l}^+ c_{3,l} \rangle, \\ A_2 &= \langle c_{1,l}^+ c_{2,l} \rangle = \langle c_{1,l+1}^+ c_{3,l} \rangle, \\ A_3 &= \langle c_{1,l}^+ c_{3,l} \rangle = \langle c_{1,l+1}^+ c_{2,l} \rangle. \end{aligned} \quad (4.32)$$

Тут ми додатково використали інваріантність початкового спінового гамільтоніана відносно просторового відображення. Інваріантність відносно перестановки другої та третьої підґраток, дає нам такі зв'язки між різними спареннями: $A_2 = A_3^*$ ($A_2^R = A_3^R$, $A_2^I = -A_3^I$). Тут A_p^R (A_p^I) — дійсна (уявна) частина A_p . Гамільтоніан в межах отриманого наближення матиме такий вигляд:

$$\begin{aligned} H_{xx} &= \frac{1}{2} \sum_{l=1}^N [J_2 + 4J_1(A_2^R + A_2^I)](c_{2,l}^+ c_{3,l} + c_{3,l}^+ c_{2,l}) + \tilde{J}_1^R \left((c_{1,l}^+ + c_{1,l+1}^+) (c_{2,l} + c_{3,l}) + \text{h.c.} \right) \\ &+ i\tilde{J}_1^I \left((c_{1,l+1}^+ - c_{1,l}^+) (c_{2,l} - c_{3,l}) - \text{h.c.} \right) - 2(hc_{1,l}^+ c_{1,l} + h_2 c_{2,l}^+ c_{2,l} + h_2 c_{3,l}^+ c_{3,l}) + Ne_0, \end{aligned} \quad (4.33)$$

де $\tilde{J}_1^R = J_1(1 - \bar{n}_2 + A_1^R)$, $\tilde{J}_1^I = J_1(\bar{n}_2 + A_1^R)$, $h_2 = h - 2J_1(A_2^R - A_2^I)$, $e_0 = \frac{3h}{2} - 4J_1 A_1^R (A_2^R + A_2^I) + 4J_1 n_2 (A_2^R - A_2^I)$.

Після перетворення Фур'є запишемо його у матричній формі:

$$\begin{aligned} H_{xx} &= \sum_{\kappa} \sum_{p,q=1}^3 \mathcal{H}_{p,q}(\kappa) a_{p,\kappa}^+ a_{q,\kappa} + Ne_0 \quad (4.34) \\ \mathcal{H}_{11}(\kappa) &= -h, \\ \mathcal{H}_{22}(\kappa) &= \mathcal{H}_{33}(\kappa) = -h - 2J_1(A_2^R - A_2^I), \\ \mathcal{H}_{12}(\kappa) &= \mathcal{H}_{21}^*(\kappa) = \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{J}_1^R)^2 + (\tilde{J}_1^I)^2} (e^{-i\phi} + e^{i(\phi-\kappa)}), \\ \mathcal{H}_{13}(\kappa) &= \mathcal{H}_{31}^*(\kappa) = \frac{1}{2} \sqrt{(\tilde{J}_1^R)^2 + (\tilde{J}_1^I)^2} (e^{i\phi} + e^{-i(\phi+\kappa)}), \\ \mathcal{H}_{23}(\kappa) &= \mathcal{H}_{32}(\kappa) = \frac{1}{2} (J_2 + 4J_1(A_2^R + A_2^I)), \end{aligned} \quad (4.35)$$

де $\tilde{J}_1 = \sqrt{(\tilde{J}_1^R)^2 + (\tilde{J}_1^I)^2}$, $\tan \phi = \tilde{J}_1^I / \tilde{J}_1^R$.

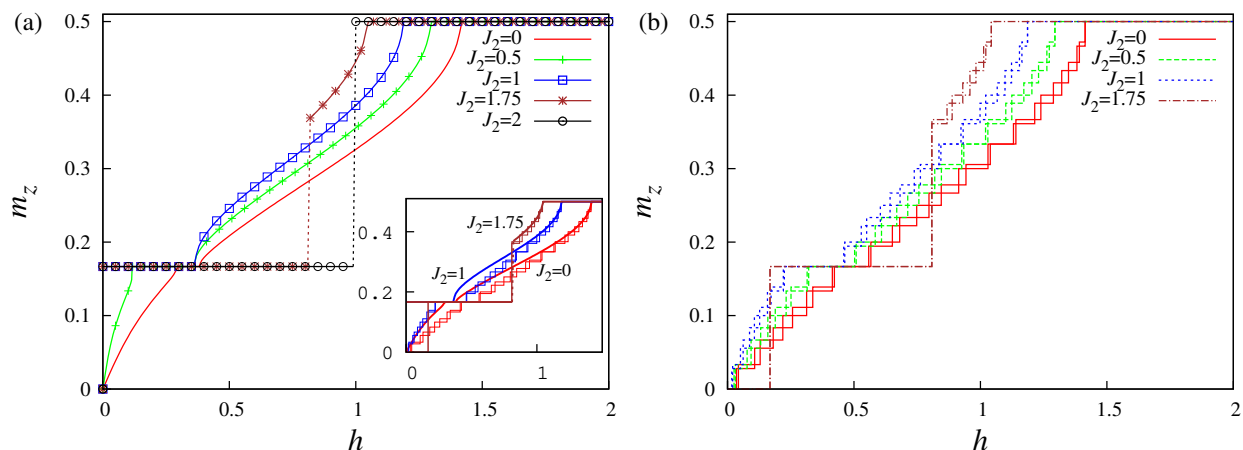


Рис. 4.8. Залежність від зовнішнього поля намагніченості симетричного ромбічного ланцюжка в основному стані: $J_1 = 1$ (а) результати наближення Гартрі-Фока порівнюються з даними точної діагоналізації у вкладці для $J_2 = 0, 1, 1.75$; (б) результати для точної діагоналізації скінченних ланцюжків $N = 30, 36$ спінів з $J_2 = 0, 0.5, 1, 1.75$.

Подібно до попереднього підрозділу, задачу переписано як вільний ферміонний газ. Гамільтоніан (4.33) або (4.34) містить невідомі спарення \bar{n}_2, A_1, A_2 . Ці спарення потрібно знайти з набору самоузгоджених рівнянь ідентичних до (4.29).

Результати для намагніченості основного стану представлено на рис. 4.8. Надалі ми приймемо $J_1 = 1$. Неважко помітити, що намагніченість для $J_2 = 2J_1$ відповідає точному результату мономер-димерної фази. Слідуючи аргументам попереднього підрозділу, можна показати, що наближення Гартрі-Фока відтворює цю фазу, яка є точною у цьому випадку. Зрозуміло, що для $J_2 \geq 2J_1$ крива намагніченості все ще має східчасту форму і відповідає точному результату. Для проміжних значень J_2 ми також отримуємо добрий збіг з даними точної діагоналізації, і навіть відтворюємо стрибок намагніченості для проміжних полів. Однак наближені результати для намагніченості у слабких полях показують помітну різницю з даними точної діагоналізації. Крім того, для $J_2 \gtrsim 0.86J_1$ ми отримуємо некоректну ненульову намагніченість навіть для нульових полів h . Добре відомо, що, якщо $0.909 < J_2/J_1 < 2$, синглетна димер-тетрамерна фаза є основним станом ізотропного ромбічного ланцюжка [99]. Ця фаза зберігається і в моделі з анізотропією легкої площини [106]. Елементарна магнітна комірка в цьому ви-

падку подвоюється. Тому в даному підході, де подвоєння елементарної комірки не враховується, ця фаза не з'являється. При більших полях димер-тетрамерний порядок руйнується, залишаючи лише стан синглетних димерів на вертикальних зв'язках (див. рис. 4.8(b)). Оскільки елементарна магнітна комірка у цій фазі не подвоєна, ми отримуємо чудову згоду між наближеними і даними точними діагоналізації (див. вставку на рис. 4.8(a)). Наші дані точної діагоналізації також збігаються з попередніми результатами для ромбічного XXZ ланцюжка з анізотропією типу легкої площини [106, 317, 318]. Модель з анізотропією легкої площини в нульовому полі характеризується фазою спінової рідини для $J_2 \lesssim J_1$ (див. рис. 3 у статті [106]) на противагу ізотропної моделі, де феримагнітний порядок зберігається в основному стані [99]. Дані точної діагоналізації вказують на неперервне зростання намагніченості основного стану з полем для $J_2 \lesssim J_1$. Зазвичай це ознака безщільного спектра збудження і фази спінової рідини. Для сильніших зв'язків J_2 отримуємо плато нульової намагніченості та дуже різке зростання намагніченості до плато $1/3$ при деякому критичному полі ($h \approx 0.168J_1$ для $J_2 = 1.75J_1$). Фазу з плато нульової намагніченості можна ідентифікувати як синглетну димер-тетрамерну фазу, і критичне поле як поле, яке руйнує тетрамери в основному стані. З фазової діаграми основного стану, представленої на рис. 4.9, робимо висновок, що розглянутий підхід Гартрі-Фока не в змозі відтворити синглетну димер-тетрамерну фазу з нульовим плато намагніченості, яке з'являється в тонкій області малих полів і $1 \lesssim J_2/J_1 \leq 2$ відповідно до даних точної діагоналізації. Проте, як тільки магнітна комірка більше не подвоюється, фазова діаграма основного стану добре узгоджується з точними даними діагоналізації.

З порівняння результатів попереднього підрозділу бачимо, що обидві формули з різним калібруванням дають ті самі результати для властивостей основного стану, що свідчить про калібрувальну інваріантність моделі навіть у наближенні Гартрі-Фока.

Результати точної діагоналізації також показують деякі ознаки другого плато при $2/3$ насиченої намагніченості. Зауважимо, що розвинутий тут підхід Гартрі-Фока не може відтворити таку поведінку. Щоб отримати його, потрібно

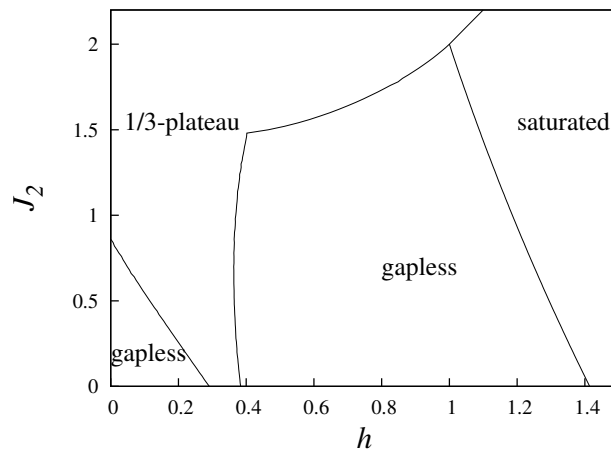


Рис. 4.9. Діаграма основного стану у площині $h - J_2$ для симетричного ромбічного ланцюжка з $J_1 = J_3 = 1$ у наближенні Гартрі-Фока.

розглянути можливість подвоєння елементарної магнітної комірки в процедурі розв'язку що не було припущено в рівняннях (4.32) і (4.33).

4.3. Вплив XXZ анізотропії на основний стан ромбічного ланцюжка

Далі розглянемо загальніший випадок XXZ моделі на ромбічному ланцюжку. Його гамільтоніан можна записати як $H = H_{xx} + H_{zz}$, де H_{xx} задано рівнянням (4.1),

$$H_{zz} = \frac{\Delta}{2} \sum_{l=1}^N \left[(J_2 s_{2,l}^z s_{3,l}^z + J_1 (s_{1,l}^z s_{2,l}^z + s_{3,l}^z s_{1,l+1}^z)) + J_3 (s_{1,l}^z s_{3,l}^z + s_{2,l}^z s_{1,l+1}^z) \right]. \quad (4.36)$$

Тут Δ — параметр анізотропії XXZ обмінної взаємодії. Як зауважено вище, ферміонне представлення zz взаємодії містить чотириферміонний доданок, який ми в подальшому розглядатимемо в дусі наближення Гартрі-Фока. Всі взаємодіючі доданки факторизуються, зберігаючи усі парні кореляції між найближчими сусідами $\langle c_{p,l}^+ c_{q,m} \rangle$. Таким чином, гамільтоніан стає білінійною формою в термінах операторів Фермі. Її можна діагоналізувати за допомогою перетворень Фур'є та Боголюбова, та розрахувати термодинаміку і ферміонні кореляційні функції. Результат параметрично залежить від невідомих елементарних спарень $\langle c_{p,l}^+ c_{q,m} \rangle$, які потрібно знайти самоузгоджено. Розв'язуючи самоузгоджене рівняння, ми зна-

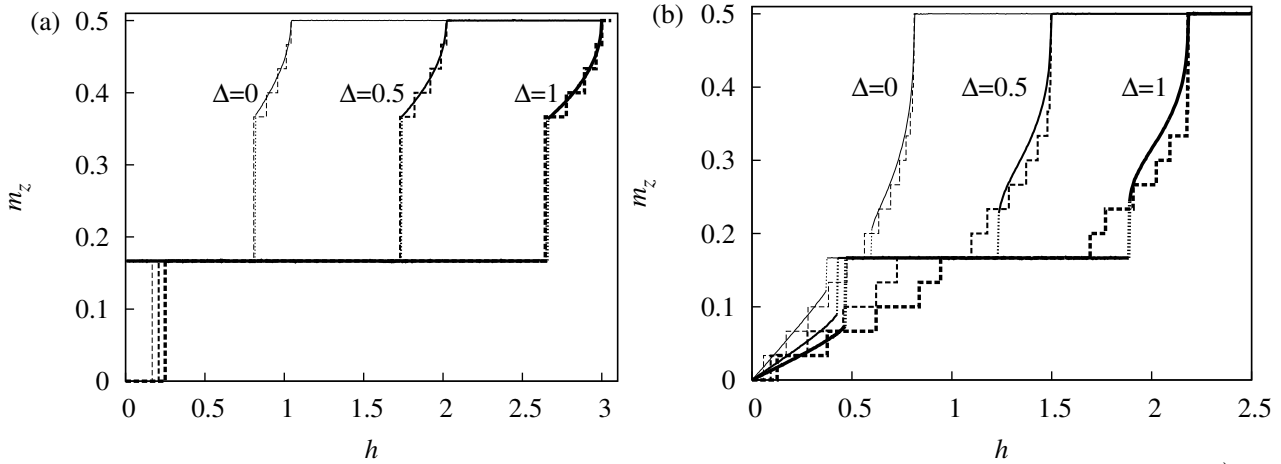


Рис. 4.10. Намагніченість в залежності від зовнішнього поля при $T = 0$: а) $J_1 = J_3 = 1$, $J_2 = 1.75$; б) $J_1 = 1$, $J_2 = 1.25$, $J_3 = 0.45$. Східчасті штриховані лінії відповідають даним точної діагоналізації для 30 спінів, суцільні лінії — результат самоузгодженого підходу, пунктирні лінії позначають стрибки намагніченості.

йшли, що мономер-димерна фаза [99] відтворюється в основному стані симетричного ромбічного ланцюжка. Дійсно, якщо $J_2 \geq 2J_1$ і зовнішнє поле $0 < h < J_1\Delta + J_2(1 + \Delta)/2$, отримуємо розв'язки для елементарних спарень: $\langle c_{1,l}^+ c_{1,l} \rangle = 1$, $\langle c_{2,l}^+ c_{2,l} \rangle = \langle c_{3,l}^+ c_{3,l} \rangle = 1/2$, $\langle c_{1,l}^+ c_{2,l} \rangle = \langle c_{1,l}^+ c_{3,l} \rangle = 0$, $\langle c_{2,l}^+ c_{3,l} \rangle = -1/2$. Це визначає основний стан відповідної ферміонної моделі $|GS\rangle = \prod_l c_{1,l}^+ (c_{2,l}^+ - c_{3,l}^+) / \sqrt{2} |0\rangle$, де $|0\rangle$ позначає вакуумний стан. Використавши співвідношення між ферміонними та спіновими станами, можна побачити, що це відповідає мономер-димерній фазі на мові спінів (див. також обговорення вище). Результати для симетричного ромбічного ланцюжка нижче межі, де реалізується мономер-димерна фаза, показано на рис. 4.10(a). Вони демонструють чудову згоду з точними даними діагоналізації за винятком області невеликих полів, де наше наближення типу середнього поля дає ненульову намагніченість. Як приклад дисторсного ланцюжка, ми вибрали набір параметрів, який використовувався раніше для азуриту [319]. На рис. 4.10(b) ми отримуємо добру згоду з XX границею моделі. Зокрема, крива намагніченості показує $1/3$ -плато та нульову намагніченість у нульовому полі. Проте, для ізотропної взаємодії Гайзенберга невідповідність між наближеними та точними результатами швидко зростають нижче верхнього критичного поля. Дані точної діагоналізації для $\Delta = 1$ показують злам на кривій намагніченості при $2/3$ нама-

гніченості насичення. Це може бути ознакою того, що у цьому випадку магнітна комірка подвоюється. Як обговорювалося вище, щоб описати таку поведінку, необхідно розглядати також неоднорідні елементарні спарення.

Сформульоване вище наближення також перевірено у порівнянні з точними результатами для ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга, які отримані за допомогою декораційно-ітераційної процедури [100]. Це особливий випадок анізотропного ромбічного ланцюжка, де спіни на вертикальному зв'язку пов'язані взаємодією Гайзенберга, тоді як всі інші взаємодії є типу Ізинга. Розглянута тут модель відповідає роботі [100], якщо покласти $J_1^{x,y} = J_3^{x,y} = 0$, $J_2^{x,y} = \Delta J_2$, $J_1^z = J_3^z = J_1$, $J_2^z = J_2$. Залежно від співвідношення між взаємодіями, анізотропією та зовнішнім полем система може перебувати у різних фазах: $|\text{FRI}\rangle = \prod_l |\downarrow_{1,l}\rangle |\uparrow_{2,l}\uparrow_{3,l}\rangle$, $|\text{FRU}\rangle = \prod_l |\uparrow_{1,l}\rangle (|\uparrow_{2,l}\downarrow_{3,l}\rangle - |\downarrow_{2,l}\uparrow_{3,l}\rangle)/\sqrt{2}$, $|\text{SPP}\rangle = \prod_l |\uparrow_{1,l}\rangle |\uparrow_{2,l}\uparrow_{3,l}\rangle$. У рамках нашого підходу Гартрі-Фока відтворюється фазова діаграма основного стану та всі межі фаз. Згаданий стани у ферміонному представленні мають вигляд: $|\text{FRI}\rangle = \prod_l c_{2,l}^+ c_{3,l}^+ |0\rangle$, $|\text{FRU}\rangle = \prod_l c_{1,l}^+ (c_{2,l}^+ - c_{3,l}^+)/\sqrt{2} |0\rangle$, $|\text{SPP}\rangle = \prod_l c_{1,l}^+ c_{2,l}^+ c_{3,l}^+ |0\rangle$.

4.4. Висновки

У цьому розділі, ми розглянули застосування перетворення Йордана-Вігнера у комбінації з наближення Гартрі-Фока для ферміонізованого гамільтоніану фрустрованих спин-1/2 ланцюжків. 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 точними даними діагоналізації, і ми навіть відновлюємо точний результат у точці Маджумдара-Гоша [92]. Розташування 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, спин-спінові кореляції повинні загасати за степеневим законом нижче

J_{2c} [89], 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 [90]. Лише при $\Delta = 0$ ми знаходимо $J_{2c} = J_{2,\text{dim}} = 0$ і відтворюємо фазовий перехід безмежного порядку до димеризованого стану (4.10).

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 [94]. 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 $J_2 > J_1/2$.

Даний підхід було також застосовано до спін-1/2 XXZ моделі на ромбічному ланцюжку, який у найзагальнішому випадку може бути дисторсним. В останньому випадку 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 відтворення магнітних властивостей при високих полях або малих фрустраціях. Підсумовуючи наші висновки, 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 характерні для азуриту [173, 175, 319, 320].

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.

РОЗДІЛ 5

СПІН-1/2 ДВОНОГА ДРАБИНКА ЗІ ВЗАЄМОДІЯМИ ГАЙЗЕНБЕРГА ТА ІЗИНГА

У цьому розділі отримано ряд строгих результатів для драбинок зі змішаним типом взаємодій Гайзенберга та Ізинга. Таку модель можна перетворити на квантовий ланцюжок Ізинга з композитними спінами в ефективному поперечному та поздовжньому полях, використовуючи або представлення станів на зв'язках, або унітарне перетворення. Показано, що основний стан такої драбинки Гайзенберга-Ізинга походить від трьох точно розв'язних моделей: квантового ланцюжка Ізинга в поперечному полі, “класичного” ланцюжка Ізинга в поздовжньому полі або моделі невзаємодіючих спінів у “стрибаючому” поздовжньо-поперечному полі. Остання модель відповідає фазі з чергуванням синглетних і триплетних зв'язків на щаблях двонової драбинки, що з'являється при помірних значеннях зовнішньої магнітного поля i , отже, призводить до дробового плато на половині намагніченості насичення.

Окремо розглянуто випадок тетраедричного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга, який є не що інше, як випадок повністю фрустрованої двонової драбинки Ізинга-Гайзенберга. Завдяки локальному збереженню повного спіна на кожному щаблі, модель можна звести до “класичного” вигляду та розв'язати методом матриці переносу [321]. Розраховано фазову діаграму основного стану, процес намагнічення, магнетокалоричний ефект і основні термодинамічні величини моделі.

На завершення, досліджено магнетоелектричний ефект у спін-1/2 драбинці Гайзенберга-Ізинга у присутності зовнішнього електричного та магнітного полів та з урахуванням механізму Кацури-Нагаоши-Балацького. Показано, що прикладене

електричне поле може контролювати квантовий фазовий перехід між упорядкованою фазою Нееля та неупорядкованою парамагнітною фазою. Порядок Нееля зникає відповідно до степеневого закону з критичним показником типу Ізинґа $1/8$, електрична поляризація демонструє слабку сингулярність, а діелектрична сприйнятливість демонструє логарифмічну розбіжність для цього конкретного квантового фазового переходу. Зовнішнє електричне поле може викликати фазовий перехід першого роду, що супроводжується різкими стрибками діелектричної поляризації та сприйнятливості, якщо припустити, що зовнішнє магнітне поле стає ненульовим.

Основні результати цього розділу викладені у роботах [18–21, 47, 48, 50].

5.1. Унітарне перетворення до димерного базису у моделі двоногії драбинки

Задамо спін- $\frac{1}{2}$ двоногу драбинку Гайзенберґа-Ізинґа через такий гамільтоніан (див. також рис. 5.1):

$$H = \sum_{i=1}^N \left[J_1(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_{\Delta} + J_2(s_{1,i}^z s_{1,i+1}^z + s_{2,i}^z s_{2,i+1}^z) + J_3(s_{2,i}^z s_{1,i+1}^z + s_{1,i}^z s_{2,i+1}^z) - h(s_{1,i}^z + s_{2,i}^z) \right], \quad (5.1)$$

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 спін- $\frac{1}{2}$ оператора, перший індекс позначає номер ланцюжка, другий — порядковий номер вузла, J_1 — XXZ взаємодія Гайзенберґа між спінами на одному щаблі, J_2 — Ізинґова взаємодія між сусідніми спінами одного ланцюжка, J_3 — перехресна (діагональна) Ізинґова 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 збереженою величиною. Тому для подальшої зручності доцільно скористатися перевагами представлення станів на димерах, яке було спочатку запропоновано Лібом, Шульцем та Матісом для ланцюжка Гайзенберга-Ізинга [108]. Введемо базис станів на зв'язку, що складається з чотирьох векторів стану:

$$\begin{aligned} |\phi_{0,0}^i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle - |\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle), & |\phi_{1,0}^i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle + |\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle), \\ |\phi_{1,-}^i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle - |\downarrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle), & |\phi_{1,+}^i\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle + |\downarrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle). \end{aligned} \quad (5.2)$$

Ці стани є власними на зв'язку Гайзенберга між двома спінами, розташованими на i -ому щаблі, тобто $|\phi_{0,0}^i\rangle$ — стан синглетного зв'язку, $|\phi_{1,0}^i\rangle$, $|\phi_{1,\pm}^i\rangle$ є триплетними станами. Слідуючи [108], можна виділити два підпростори: і) $|\phi_{0,0}^i\rangle$, $|\phi_{1,0}^i\rangle$, ii) $|\phi_{1,+}^i\rangle$, $|\phi_{1,-}^i\rangle$. Перший і другий підпростори відповідають $(S_i^z)^2 = 0$ і $(S_i^z)^2 = 1$ відповідно, і гамільтоніан можна діагоналізувати окремо в кожному підпросторі. Можна ввести індекс підпростору на i -му вузлі: $n_i = 0(1)$, якщо даний стан знаходиться в підпросторі з $(S_i^z)^2 = 0$ ($(S_i^z)^2 = 1$), охопленим станами $|\phi_{0,0}^i\rangle$, $|\phi_{1,0}^i\rangle$ ($|\phi_{1,-}^i\rangle$, $|\phi_{1,+}^i\rangle$). Відповідно до [108] стани на зв'язку також називатимемо чистими (домішковими) станами для $n_i = 0(1)$. Якщо запровадити псевдоспінові позначення для станів $|\phi_{0,0}^i\rangle = |\downarrow\rangle_0^i$, $|\phi_{1,0}^i\rangle = |\uparrow\rangle_0^i$, дію спін- $\frac{1}{2}$ операторів у підпросторі $n_i = 0$ можна виразити через нові оператори піднімання та опускання:

$$s_{1,i}^z = -\frac{1}{2}(a_i^+ + a_i) = -\tilde{s}_i^x, \quad s_{2,i}^z = \frac{1}{2}(a_i^+ + a_i) = \tilde{s}_i^x,$$

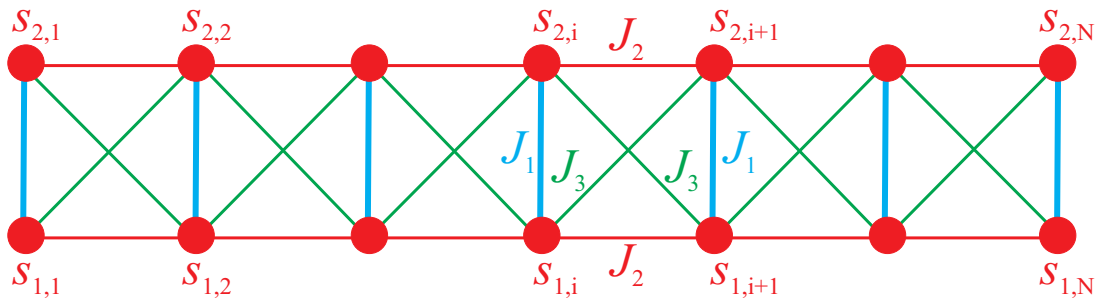


Рис. 5.1. Спін- $\frac{1}{2}$ двонога драбинка Ізинга-Гайзенберга. Товсті (тонкі) лінії позначають Гайзенбергові (Ізингові) зв'язки.

$$(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_{\Delta} = a_i^+ a_i - \frac{2 + \Delta}{4} = \tilde{s}_i^z - \frac{\Delta}{4}. \quad (5.3)$$

Оператори a_i^+ , a_j задовольняють алгебрі Паулі ($\{a_i, a_i^+\} = 0$, $\{a_i, a_i\} = \{a_i^+, a_i^+\} = 0$, $[a_i, a_j] = [a_i, a_j^+] = [a_i^+, a_j^+] = 0$ для $i \neq j$), і $\tilde{s}_i^x = (a_i^+ + a_i)/2$ — новий псевдоспіновий оператор.

Аналогічно можна розглянути псевдоспінове представлення в іншому підпросторі $n_i = 1$ ($|\phi_{1,-}^i\rangle = |\downarrow\rangle_1^i$, $|\phi_{1,+}^i\rangle = |\uparrow\rangle_1^i$) і знайти дію спінових операторів там:

$$s_{1,i}^z = \frac{1}{2}(a_i^+ + a_i) = \tilde{s}_i^x, \quad s_{2,i}^z = \frac{1}{2}(a_i^+ + a_i) = \tilde{s}_i^x, \quad (\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_{\Delta} = \frac{\Delta}{4}. \quad (5.4)$$

Поєднавши (5.3), (5.4), знаходимо загальні вирази для псевдоспінового представлення цих операторів, які справедливі в обох підпросторах:

$$s_{1,i}^z = (2n_i - 1)\tilde{s}_i^x, \quad s_{2,i}^z = \tilde{s}_i^x, \quad (\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_{\Delta} = (1 - n_i)\tilde{s}_i^z + \frac{\Delta}{4}(2n_i - 1). \quad (5.5)$$

Ефективний гамільтоніан можна переписати в термінах нових операторів:

$$H = \sum_{i=1}^N \left\{ J_1(1 - n_i)\tilde{s}_i^z - 2hn_i\tilde{s}_i^x + \frac{J_1\Delta}{4}(2n_i - 1) + [4J_2n_in_{i+1} - 2(J_2 - J_3)(n_i + n_{i+1} - 1)] \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x \right\}. \quad (5.6)$$

Варто зазначити, що рівняння (5.5) можна розглянути як деяке нелінійне спінове перетворення від $s_{1,i}^{\alpha}$, $s_{2,i}^{\alpha}$ до нових операторів $s'_{1,i}{}^{\alpha}$, $s'_{2,i}{}^{\alpha}$, де наприклад $s'_{1,i}{}^z = (n_i - \frac{1}{2})$, $s'_{2,i}{}^{\alpha} = \tilde{s}_i^{\alpha}$. Перетворення може бути згенероване таким унітарним оператором:

$$U = \prod_{i=1}^N \exp \left[-i\frac{\pi}{2}(s_{1,i}^x + s_{2,i}^x) \right] \exp(i\pi s_{1,i}^x s_{2,i}^x) \exp \left(-i\frac{\pi}{2} s_{2,i}^y \right) \exp(i\pi s_{2,i}^z). \quad (5.7)$$

Вирішальним є другий множник, який вносить нелінійність. Інші складові — це повороти в спіновому просторі, вони використовуються для налаштування перетворених операторів до форми (5.5). Остаточно, спінові оператори перетворюються таким чином:

$$U s_{1,i}^x U^+ = s_{1,i}^x, \quad U s_{1,i}^y U^+ = 2s_{1,i}^y s_{2,i}^x, \quad U s_{1,i}^z U^+ = 2s_{1,i}^z s_{2,i}^x,$$

$$Us_{2,i}^x U^+ = 2s_{1,i}^x s_{2,i}^z, \quad Us_{2,i}^y U^+ = -2s_{1,i}^x s_{2,i}^y, \quad Us_{2,i}^z U^+ = s_{2,i}^x. \quad (5.8)$$

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

$$\begin{aligned} UHU^+ = & \sum_{i=1}^N \left\{ \frac{J_1}{2} (1 - 2s_{1,i}^z) s_{2,i}^z + \frac{J_1 \Delta}{2} s_{1,i}^z + \left[J_2 (4s_{1,i}^z s_{1,i+1}^z + 1) \right. \right. \\ & \left. \left. + 2J_3 (s_{1,i+1}^z + s_{1,i}^z) \right] s_{2,i}^x s_{2,i+1}^x - h(1 + 2s_{1,i}^z) s_{2,i}^x \right\}. \end{aligned} \quad (5.9)$$

Пряма відповідність $s_{1,i}^z = n_i - \frac{1}{2}$, $s_{2,i}^\alpha = \tilde{s}_i^\alpha$ вказує на еквівалентність між гамільтоніанами (5.6) і (5.9). Слід зазначити, що такий вигляд представлень залишається справедливим також у випадку асиметричної драбинки, коли обидві діагональні (перехресні) взаємодії Ізинґа відрізняються одна від одної.

5.2. Основний стан спін-1/2 двоногї драбинки зі взаємодіями Гайзенберґа та Ізинґа

Гамільтоніан (5.6) можна переписати у симетричній формі:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i=1}^N \left\{ J_1 (1 - n_i) \tilde{s}_i^z - 2hn_i \tilde{s}_i^x + \frac{J_1 \Delta}{4} (2n_i - 1) \right. \\ & \left. + [2(J_2 + J_3)n_i n_{i+1} + 2(J_2 - J_3)(1 - n_i)(1 - n_{i+1})] \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x \right\}. \end{aligned} \quad (5.10)$$

Таким чином, ефективна модель розпадається на i -му щаблі на два незалежні ланцюжки за умови, що два сусідні зв'язки знаходяться в різних підпросторах, тобто $n_i \neq n_{i+1}$. Однорідні гамільтоніани, коли всі $n_i = 0$ або всі $n_i = 1$, мають такий вигляд:

$$H^0 = \sum_{i=1}^N \left[J_1 \left(\tilde{s}_i^z - \frac{\Delta}{4} \right) + 2(J_2 - J_3) \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x \right], \quad (5.11)$$

$$H^1 = \sum_{i=1}^N \left[2(J_2 + J_3) \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x - 2h \tilde{s}_i^x + \frac{J_1 \Delta}{4} \right]. \quad (5.12)$$

Якщо всі зв'язки знаходяться в чистих станах ($n_i = 0$), отримуємо ефективний гамільтоніан ланцюжка Ізинґа в поперечному полі, що точно розв'язується в рамках

ферміонізації Йордана-Вігнера [216, 322]. Якщо всі зв'язки знаходяться в домішкових станах ($n_i = 1$), приходимо до ланцюжка Ізинґа в поздовжньому полі, який можна розв'язати методом матриці переносу (див., наприклад, [321]). Відповідно, енергія основного стану моделі в підпросторі $n_i = 0$ відповідає енергії основного стану поперечного ланцюжка Ізинґа [322]:

$$e_0^0 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_0^0(N)}{N} = -\frac{(J_1 + |J_2 - J_3|)}{\pi} \mathbf{E}(\sqrt{1 - \gamma^2}) - \frac{J_1 \Delta}{4}, \quad (5.13)$$

де $\gamma = \frac{J_1 - |J_2 - J_3|}{J_1 + |J_2 - J_3|}$ і $\mathbf{E}(\kappa) = \int_0^{\frac{\pi}{2}} d\theta \sqrt{1 - \kappa^2 \sin^2 \theta}$ — повний еліптичний інтеграл другого роду.

Енергія основного стану моделі в підпросторі $n_i = 1$ відповідає енергії основного стану ефективного ланцюжка Ізинґа в поздовжньому полі:

$$e_0^1 = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{E_0^1(N)}{N} = \begin{cases} \frac{J_1 \Delta}{4} + \frac{J_2 + J_3}{2} - |h|, & \text{якщо } |h| > (J_2 + J_3), \\ \frac{J_1 \Delta}{4} - \frac{J_2 + J_3}{2}, & \text{якщо } |h| \leq (J_2 + J_3). \end{cases} \quad (5.14)$$

Верхній (нижній) варіант відповідає феромагнітно (антиферомагнітно) впорядкованому стану, як основному стану при досить сильних (слабких) магнітних полях.

5.2.1. Фазова діаграма основного стану за відсутності магнітного поля

Якщо зовнішнє поле дорівнює нулю ($h = 0$), то основний стан завжди відповідає однорідній конфігурації зв'язку. Для доведення достатньо показати, що нерівність $E_0^0(N_1) + E_0^0(N_2) \geq E_0^0(N_1 + N_2)$ виконується для будь-якого скінченного поперечного ланцюжка Ізинґа з вільними кінцями. Тут $E_0^0(N)$ позначає енергію основного стану гамільтоніана:

$$H^0(N) = 2(J_2 - J_3) \sum_{i=1}^{N-1} \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x + J_1 \sum_{i=1}^N \left(\tilde{s}_i^z - \frac{\Delta}{4} \right). \quad (5.15)$$

Дійсно, два незалежні ланцюжки розміром N_1 і N_2 можна представити таким гамільтоніаном:

$$\begin{aligned} H^0(N_1, N_2) &= 2(J_2 - J_3) \sum_{i=1}^{N_1-1} \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x + 2(J_2 - J_3) \sum_{i=N_1+1}^{N_1+N_2-1} \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x + J_1 \sum_{i=1}^{N_1+N_2} \left(\tilde{s}_i^z - \frac{\Delta}{4} \right) \\ &= H^0(N_1 + N_2) - 2(J_2 - J_3) \tilde{s}_{N_1}^x \tilde{s}_{N_1+1}^x. \end{aligned} \quad (5.16)$$

Якщо $E_0^0(N)$ і $|\psi_0^N\rangle$ є найменшим власним значенням і власним станом $H^0(N)$, тоді $E_0^0(N_1, N_2) = E_0^0(N_1) + E_0^0(N_2)$ і $|\psi_0^{N_1, N_2}\rangle = |\psi_0^{N_1}\rangle |\psi_0^{N_2}\rangle$ є найменшим власним значенням і власним станом $H^0(N_1, N_2)$. Безпосереднім розрахунком можна показати, що

$$\begin{aligned} E_0^0(N_1) + E_0^0(N_2) &= \langle \psi_0^{N_1, N_2} | H^0(N_1 + N_2) | \psi_0^{N_1, N_2} \rangle \\ &= 2(J_2 - J_3) \langle \psi_0^{N_1} | \tilde{s}_{N_1}^x | \psi_0^{N_1} \rangle \langle \psi_0^{N_2} | \tilde{s}_{N_1+1}^x | \psi_0^{N_2} \rangle \geq E_0^0(N_1 + N_2). \end{aligned} \quad (5.17)$$

Тут ми використали $\langle \psi_0^{N_1} | \tilde{s}_{N_1}^x | \psi_0^{N_1} \rangle = 0$ для будь-якого скінченного ланцюжка [108, 322], і що найменше середнє значення оператора $H^0(N_1 + N_2)$ досягається в його основному стані.

Прямим розрахунком легко показати, що ця ж властивість справедлива для ланцюжка Ізинґа з вільними кінцями в нульовому поздовжньому полі, тобто,

$$E_0^1(N_1 + N_2) = E_0^1(N_1) + E_0^1(N_2) + \frac{|J_2 + J_3|}{2} \leq E_0^1(N_1) + E_0^1(N_2). \quad (5.18)$$

Тепер доведемо, що основний стан усієї моделі може відповідати лише одній з однорідних конфігурацій станів на зв'язках. З рівняння (5.10) очевидно, що ефективний гамільтоніан не містить взаємодії між спінами двох сусідніх щаблів, якщо вони знаходяться в різних підпросторах. Це означає, що ефективна модель розпадається на дві незалежні частини на кожній межі (доменній стінці) між чистими і домішковими станами. Таким чином, драбинку Гайзенберґа-Ізинґа для будь-якої заданої конфігурації зв'язків можна розглядати як набір незалежних ланцюжків двох видів і різних розмірів. Тоді енергія основного стану будь-якої навантаження обраної конфігурації зв'язку буде такою:

$$E = E_0^0(N_1) + E_0^0(N_2) + \dots + E_0^1(M_1) + E_0^1(M_2) + \dots$$

$$\geq E_0^0(N_1 + N_2 + \dots) + E_0^1(M_1 + M_2 + \dots) \quad (5.19)$$

З рівнянь (5.17) і (5.18) цілком очевидно, що одна однорідна конфігурація, яка відповідає стану з меншою енергією, ніж інша, має бути відповідно до нерівності (5.19) найнижчим енергетичним станом (тобто основним станом). Таким чином, модель демонструє в основному стані квантовий фазовий перехід першого роду коли найменші власні енергії в обох підпросторах стають однаковими $e_0^1 = e_0^0$. Крім того, може з'явитися більш яскравий (неперервний) квантовий фазовий перехід другого роду при $|J_1| = |J_2 - J_3|$ в основному стані, який властивий чистому квантовому спіновому ланцюжку [322]. З цієї точки зору драбинка Гайзенберга-Ізинга може показати різноманітність квантових фазових переходів на його фазовій діаграмі.

Фазова діаграма основного стану спін- $\frac{1}{2}$ драбинки Гайзенберга-Ізинга в нульовому магнітному полі показана на рис. 5.2. Вона відображає симетрії моделі, тобто є інваріантною щодо перестановки Ізингових взаємодій J_2 і J_3 , а також щодо одночасної зміни знаків J_2 і J_3 . Загалом на малюнку 5.2 можна розпізнати п'ять різних основних станів:

1. **Квантовий парамагнітний (QPM) стан** для $e_0^0 < e_0^1$ і $|J_1| > |J_2 - J_3|$: еквівалентний поперечний ланцюжок Ізинга (5.11) знаходиться в щільному неупорядкованому стані без спонтанної намагніченості $\langle \tilde{s}_i^x \rangle = 0$ і ненульовою намагніченістю $\langle \tilde{s}_i^z \rangle \neq 0$, індуковану ефективним поперечним полем. Для оригінальної драбинки Гайзенберга-Ізинга це означає, що синглетні димери домінують на щаблях Гайзенберга в основному стані. Хоча кожен зв'язок може мати антиферомагнітний порядок, взаємодія вздовж ланцюжків руйнує його і призводить до неупорядкованого квантового парамагнітного стану.
2. **Стан стрічкоподібного впорядкування вздовж ланцюжків (SL)** для $e_0^0 < e_0^1$ і $|J_1| < J_3 - J_2$: еквівалентний поперечний ланцюжок Ізинга демонструє спонтанне феромагнітне впорядкування з $\langle \tilde{s}_i^x \rangle \neq 0$. Завдяки співвідношенням (5.3) і (5.4) для драбинки Гайзенберга-Ізинга $\langle s_{1,i}^z \rangle = \langle s_{1,i+1}^z \rangle =$

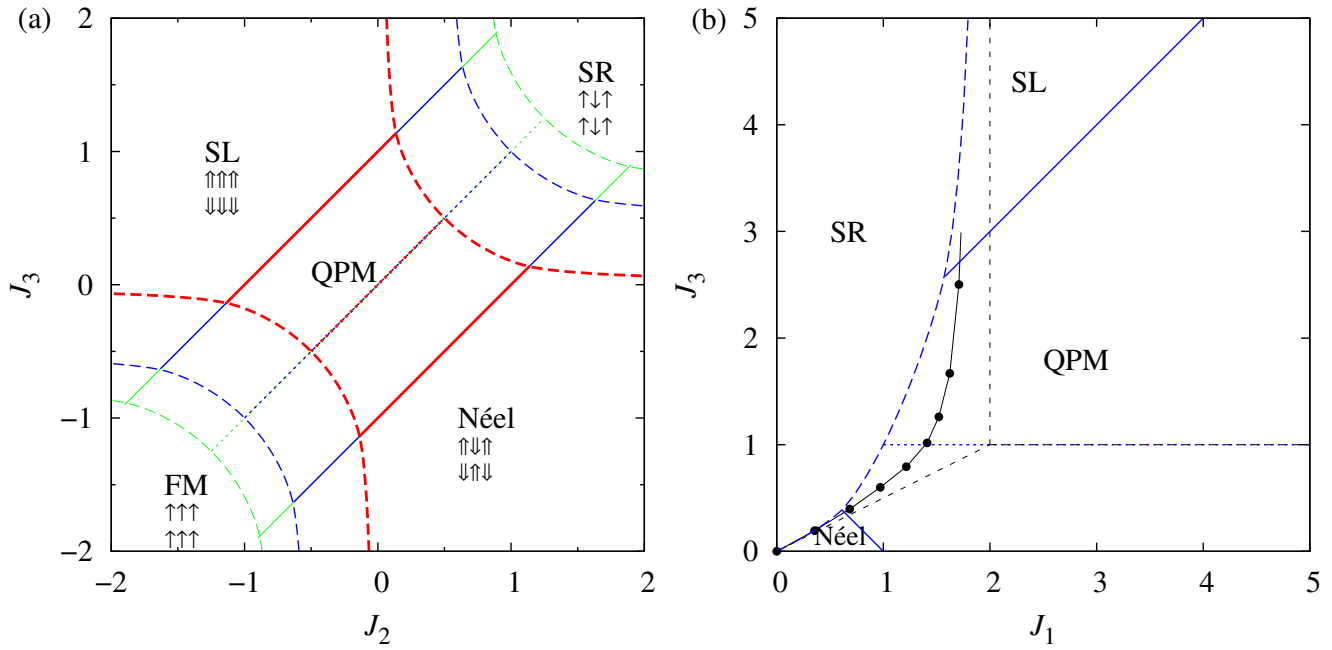


Рис. 5.2. Фазові діаграми основного стану для спин- $\frac{1}{2}$ двоногій драбинки Гайзенберга-Ізинга за відсутності зовнішнього магнітного поля ($h = 0$). Пунктирними (суцільними) лініями позначені лінії квантових фазових переходів першого (другого) роду, пунктирними лініями позначено синглет-димерний стан на щаблях. (a) $J_1 = 1$, $\Delta = 0.0$ (червоні), 1.0 (сині), 1.5 (зелені) (від товстих до тонких ліній); (b) $J_2 = 1$, $\Delta = 1$. Товсті і штрихові (сині) лінії — межі основних станів драбинки Гайзенберга-Ізинга, тонкі лінії з символами вказують на міжфазну межу в драбинці Гайзенберга [323], а прямі штриховані лінії відповідають межам фаз в Ізинговій драбинці.

$-\langle s_{2,i}^z \rangle = -\langle s_{2,i+1}^z \rangle \neq 0$. Цей результат означає, що драбинка Гайзенберга-Ізинга демонструє ферромагнітний порядок уздовж ланцюжків і антиферромагнітний порядок уздовж щаблів, тобто намагніченості ланцюжків протилежні. Намагніченість у шаховому порядку як відповідний параметр порядку в цій фазі відмінна від нуля, і вона демонструє очевидне квантове зменшення намагніченості, що визначається як: $m_{SL}^z = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (\langle s_{1,i}^z \rangle - \langle s_{2,i}^z \rangle) = \frac{1}{2} [1 - J_1^2 / (J_2 - J_3)^2]^{\frac{1}{8}}$. Тут ми використали результат для спонтанного намагнічення поперечного ланцюжка Ізинга [322].

3. **Стан Нееля** для $e_0^0 < e_0^1$, і $|J_1| < J_2 - J_3$: ефективний поперечний ланцюжок Ізинга володіє спонтанним антиферромагнітним порядком з $\langle \tilde{s}_i^x \rangle = (-1)^i m_x \neq 0$. Отже, для драбинки Гайзенберга-Ізинга отримуємо $\langle s_{1,i}^z \rangle =$

$-\langle s_{1,i+1}^z \rangle = -\langle s_{2,i}^z \rangle = \langle s_{2,i+1}^z \rangle \neq 0$. Звідси випливає, що найближчі спіни як вздовж ланцюжків, так і шаблів демонструють переважно антиферомагнітне впорядкування. Залежність шахової намагніченості як відповідного параметра порядку є цілком аналогічною попередньому випадку $m_{AF}^z = \frac{1}{2N} \sum_{i=1}^N (-1)^i (\langle s_{1,i}^z \rangle - \langle s_{2,i}^z \rangle) = \frac{1}{2} [1 - J_1^2 / (J_2 - J_3)^2]^{\frac{1}{8}}$.

4. **Стан стрічкоподібного впорядкування вздовж шаблів (SR)** для $e_0^1 < e_0^0$, $J_2 > 0$, $J_3 > 0$: модель демонструє класичне впорядкування в цій фазі з антиферомагнітно впорядкованими найближчими сусідніми спінами вздовж ланцюжків і феромагнітно впорядкованими найближчими сусідніми спінами вздовж шаблів.
5. **Феромагнітний (FM) стан** для $e_0^1 < e_0^0$, $J_2 < 0$, $J_3 < 0$: основний стан відповідає ідеальному повністю поляризованому феромагнітному спіновому стану.

Результати, показані на рис. 5.2(a), вказують на те, що драбинка Гайзенберга-Ізинга знаходиться в неупорядкованій фазі QPM щоразу, коли відносна сила обох взаємодій Ізинга J_2 і J_3 є досить малою порівняно з взаємодією Гайзенберга всередині шаблів J_1 . Крім того, варто відзначити, що фаза QPM зводиться до набору повністю некорельованих синглетних димерів, розміщених на всіх шаблях вздовж спеціальної лінії $J_2 = J_3$ до $e_0^1 < e_0^0$, яка зображена на рис. 5.2 пунктирними лініями. За цієї спеціальної умови спін-спінова кореляція всередині ланцюжка представляє єдину ненульову парну кореляційну функцію, а всі інші короточасні спін-спінові кореляції зникають і/або змінюють свій знак на спеціальній лінії $J_2 = J_3$. Слід зауважити, що повністю ідентичний основний стан також можна знайти в симетричній двоногій драбинці Гайзенберга з $J_2 = J_3$ (див. рис. 5.2(b)). Для порівняння синглет-димерний стан ланцюжка є точним основним станом симетричної драбинки Гайзенберга-Ізинга з $\Delta = 1$ для $J_1 > J_2$, тоді як відповідної драбинки Гайзенберга цей факторизований стан залишається основним для $J_1 > 1.4015J_2$ [324, 325] (ця горизонтальна лінія для ясності не показана на рис. 5.2(b), оскільки вона точно збігається з межею основного стану драбинки

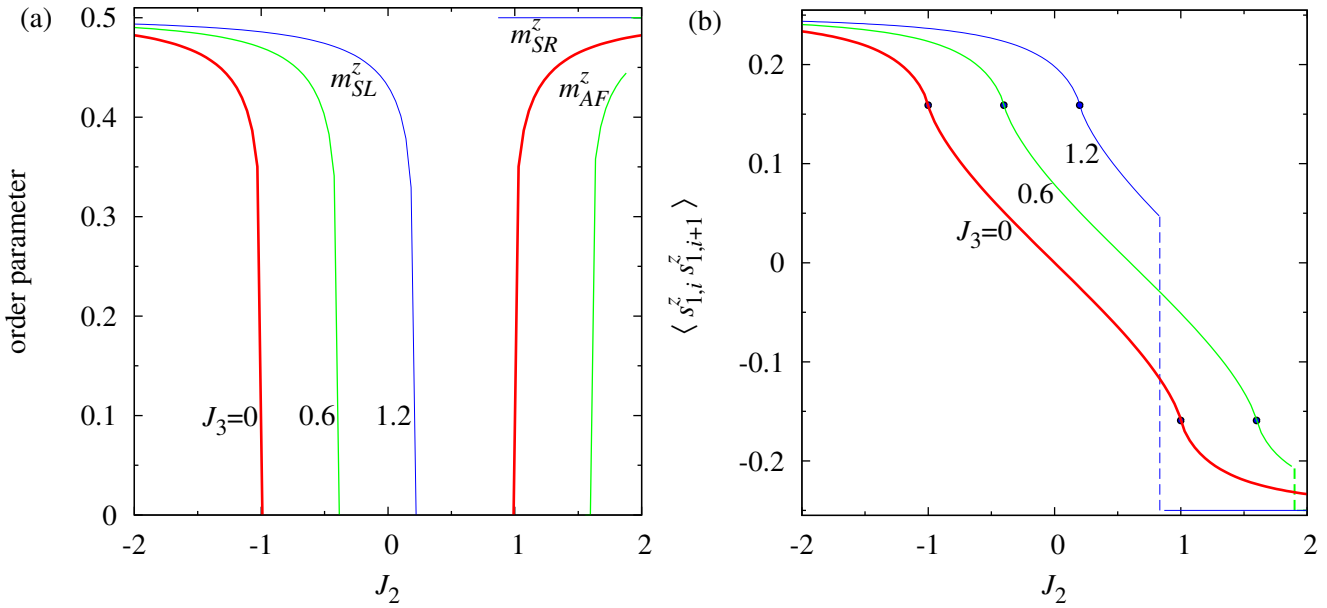


Рис. 5.3. Залежність від взаємодії Ізинґа J_2 : (а) параметрів порядку; (б) найближчої сусідньої спін-спінової кореляційної функції вздовж ланцюжків для $J_1 = 1$, $\Delta = 1$ і трьох різних значень перехресної Ізинґової взаємодії $J_3 = 0, 0.6, 1.2$.

Гайзенберґа-Ізинґа, витягнутої на більший простір параметрів). Слід, однак, підкреслити, що короткосяжні спін-спінові кореляції стають відмінними від нуля в QPM відразу, як $J_2 \neq J_3$, навіть якщо ця фаза все ще зберігає свою невпорядковану природу з переважаючим характером синглетних димерів на щаблях. Щоб підтвердити це твердження, залежності параметрів порядку від нульової температури та спін-спінову кореляцію найближчого сусіда вздовж гілок наведено на рис. 5.3. Відповідні параметри порядку, очевидно, зникають у QPM, тоді як кореляційна функція найближчих сусідів змінює свій знак при перетині спеціальної лінії $J_2 = J_3$.

Крім цього, драбинка Гайзенберґа-Ізинґа зазнає квантового фазового переходу другого роду від невпорядкованої QPM фази до спонтанно впорядкованої фази Нееля або SL, які переважно з'являються в області параметрів, де одна з Ізинґових взаємодій J_2 і J_3 є антиферромагнітною, а інша – ферромагнітною. Значне квантове зменшення параметрів шахового порядку передбачає очевидний квантовий характер обох фаз Нееля, а також SL, у яких все ще домінує антиферромагнітна кореляція на щаблях (див. рис. 5.3). Таким чином, головна відмінність між

двома квантовими фазами з далеким порядком проявляється в характері кореляції найближчих сусідів вздовж ланцюжків, яка є феромагнітною у фазі SL, але антиферомагнітною у фазі Нееля. Неперервне зникнення параметрів порядку, зображених на рис. 5.3(a), є прямим доказом квантового фазового переходу другого роду між неупорядкованою фазою QPM і впорядкованою фазою SL (або Нееля), що також супроводжується слабо-сингулярною поведінкою кореляційної функції найближчих сусідів, виділеною на рис. 5.3(b) чорними крапками. Тут слід зазначити, що zz кореляційну функцію драбинки Гайзенберга-Ізинга можна легко вивести з результату для xx кореляційної функції поперечного ланцюжка Ізинга, розрахованої в [322]. Достатньо сильні взаємодії Ізинга J_2 і J_3 можуть руйнувати антиферомагнітну кореляцію вздовж щаблів і призводять до наявності FM або SR станів в залежності від того, чи є обидві взаємодії Ізинга феромагнітними чи антиферомагнітними відповідно.

Нарешті, детальне порівняння фазових діаграм основного стану двоногих драбинок Гайзенберга, Гайзенберга-Ізинга і Ізинга, які зображені на рис. 5.2(b), показує їх спільні риси. Межа розділу фаз між класично впорядкованими фазами SR і трьома квантовими фазами (QPM, SL, Нееля) драбинки Гайзенберга-Ізинга досить точно слідує за межею фаз першого порядку між фазою типу Голдейна та димеризованою фазою чистої драбинки Гайзенберга, отриманої за допомогою високотемпературних рядів і точної діагоналізації [323]. Звичайно, фундаментальна відмінність полягає в характері фаз SR і Голдейна, оскільки перша фаза демонструє класичний дальній порядок, на противагу топологічному порядку чистої квантової фази типу Голдейна з ненульовим параметром порядку рядка [326] незважаючи на те, що феромагнітна кореляція всередині сідців є спільною для обох фаз. Різниця між основними станами двоногих драбинок Гайзенберга-Ізинга і Гайзенберга стає набагато менш вираженою в області параметрів із сильною взаємодією всередині щаблів J_1 , що викликає квантові фази в основному стані обох цих моделей. У випадку достатньо сильної фрустрації $J_2 \sim J_3$ основний стан драбинки Гайзенберга-Ізинга формує неупорядковану фазу QPM, тоді як антиферомагнітний або феромагнітний (Неельовий або SL) дальній порядок виникає

вздовж ланцюжків, якщо діагональний зв'язок J_3 є набагато слабшим або сильнішим, ніж взаємодія J_2 . Зауважимо, що квантові фази Нееля і SL мають декілька спільних рис (наприклад, переважаючі антиферромагнітні кореляції вздовж щаблів) із невпорядкованою фазою QPM, з якою вони межують на лінії квантових фазових переходів другого роду, заданих системою рівнянь: $J_3 = J_2 - J_1$ (для $J_3 < J_2$) і $J_3 = J_2 + J_1$ (для $J_3 > J_2$). Не можна виключати, що ці квантово впорядковані фази можуть стати основним станом чистої драбинки Гайзенберга, оскільки вони також передбачені наближенням середнього поля для операторів зв'язку [327, 328], але не були знайдені більшістю числових методів. Тому необхідні подальші числові дослідження драбинок Гайзенберга, щоб прояснити це невіршене питання.

5.2.2. Фазова діаграма основного стану в магнітному полі

Якщо взяти до уваги зовнішнє поле h , нерівність для основних станів ланцюжка Ізинга в поздовжньому полі (5.18) загалом справедлива лише для $J_1 + J_2 \leq 0$ або $J_1 + J_2 \geq 2|h|$. Тому необхідно змінити процедуру пошуку основних станів всередині області, де порушується співвідношення (5.18). У цьому випадку можна використати метод, запропонований Шастри та Сазерлендом [122, 329], щоб знайти основні стани всередині цієї області параметрів. Представимо наш ефективний гамільтоніан (5.10) у такій формі:

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i=1}^N H_{i,i+1}, \\
 H_{i,i+1} &= \frac{1}{2} \sum_{l=i}^{i+1} \left\{ J_1(1 - n_l) \tilde{s}_l^z - 2hn_l \tilde{s}_l^x + \frac{J_1 \Delta}{4} (2n_l - 1) \right\} \\
 &+ [2(J_2 + J_3)n_i n_{i+1} + 2(J_2 - J_3)(1 - n_i)(1 - n_{i+1})] \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x. \quad (5.20)
 \end{aligned}$$

Далі, можна застосувати варіаційний принцип, беручи до уваги, що $E_0 \geq \sum_{l=1}^N E_0(l, l+1)$, де $E_0(l, l+1)$ — найменша енергія $H_{l,l+1}$.

Щоб знайти найнижчий власний стан кожної конфігурації зв'язку, досить знайти власні енергії $H_{l,l+1}$:

- $n_i = n_{i+1} = 0$, $E_0^{0,0}(i, i+1) = -\frac{1}{2}\sqrt{J_1^2 + (J_2 - J_3)^2} - \frac{J_1\Delta}{4}$;
- $n_i = n_{i+1} = 1$,

$$E_0^{1,1}(i, i+1) = \begin{cases} \frac{J_1\Delta}{4} + \frac{J_2+J_3}{2} - |h|, & \text{якщо } |h| > (J_2 + J_3) \text{ (FM)}, \\ \frac{J_1\Delta}{4} - \frac{J_2+J_3}{2}, & \text{якщо } |h| \leq (J_2 + J_3) \text{ (AF)}. \end{cases}$$

- $n_i = 0, n_{i+1} = 1$ ($n_i = 1, n_{i+1} = 0$), $E_0^{0,1}(i, i+1) = E_0^{1,0}(i, i+1) = -\frac{J_1}{4} - \frac{|h|}{2}$.

Фазу, 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 фазі SB не існує жодних кореляцій між спінами з різних щаблів, а загальна енергія походить від спін-спінових взаємодій між ланцюжками та енергії Зеемана повністю поляризованих щаблів [330]. З порівняння $E_0^{0,1}(i, i+1)$ і $E_0^{1,1}(i, i+1)$ легко побачити, що власна енергія фази SB $E_0^{0,1}(i, i+1)$ завжди має меншу енергію ніж найменша власна енергія повністю поляризованого стану $E_0^{1,1}(i, i+1)$ всередині смуги:

$$J_2 + J_3 - \frac{J_1(1 + \Delta)}{2} \leq |h| \leq J_2 + J_3 + \frac{J_1(1 + \Delta)}{2}. \quad (5.21)$$

Звертаємо увагу, що феромагнітне впорядкування переважає для зовнішніх полів над цією смугою $|h| \geq J_2 + J_3 + \frac{J_1(1+\Delta)}{2}$, тоді як антиферомагнітне впорядкування стає найнижчим енергетичним станом під цією смугою $|h| \leq J_2 + J_3 - \frac{J_1(1+\Delta)}{2}$.

Якщо порівняти відповідні власні енергії SB фази $E_0^{0,1}(i, i+1)$ та однорідної фази $E_0^{0,0}(i, i+1)$ ($n_i = n_{i+1} = 0$), отримуємо іншу умову, що $E_0^{0,1}(i, i+1)$ стає нижчим за $E_0^{0,0}(i, i+1)$, якщо лише

$$|h| \geq \sqrt{J_1^2 + (J_2 - J_3)^2} - \frac{J_1(1 - \Delta)}{2}. \quad (5.22)$$

Це означає, що фаза SB із загальною енергією $E_0^{0,1} = -N(J_1 + 2|h|)/4$ стає основним станом всередині області, обмеженої умовами (5.21) і (5.22). Найнижче поле, яке робить фазу SB домінуючою, також можна знайти як:

$$|h_{min}| = \frac{J_1(1 + \Delta)}{2}. \quad (5.23)$$

Подібним чином можна також знайти умову, за якої енергія феромагнітного стану однорідної домішкової конфігурації стає найменшою, якщо зовнішнє поле

перевищує граничне значення:

$$|h| \geq \frac{1}{2} \left[J_2 + J_3 + J_1 \Delta + \sqrt{J_1^2 + (J_2 - J_3)^2} \right], \quad (5.24)$$

тоді як умова на антиферромагнітний стан однорідної домішкової конфігурації є незалежна від зовнішнього поля:

$$J_1 \Delta + \sqrt{J_1^2 + (J_2 - J_3)^2} \leq (J_2 + J_3). \quad (5.25)$$

Варто зауважити, що неможливо знайти основний стан поза межами (5.22), (5.24), (5.25) за допомогою варіаційного принципу. Однак у додатку статті [18] показано, що конфігурація зв'язку, яка відповідає основному стану, не може перевищувати періоду два. Тому основний стан потрібно шукати лише серед станів, які відповідають таким конфігураціям зв'язку: усі $n_i = 0$; усі $n_i = 1$; $n_{2i-1} = 0, n_{2i} = 1$ ($n_{2i-1} = 1, n_{2i} = 0$). У цьому відношенні можливі дві фази всередині смуги, заданої (5.21). Основний стан драбинки Гайзенберга-Ізинга утворює фазу SB, якщо $e_0^{0,1} < e_0^0$:

$$|h| \geq \frac{2(J_1 + |J_2 - J_3|)}{\pi} \mathbf{E}(\sqrt{1 - \gamma^2}) - \frac{J_1(1 - \Delta)}{2}. \quad (5.26)$$

Побудовано декілька фазових діаграм основного стану на рис. 5.4-5.6 для ненульового магнітного поля. Найцікавішою особливістю є те, що фаза SB може стати основним станом для магнітного поля $h \geq \frac{J_1(1+\Delta)}{2}$, яке є достатньо сильним, щоб порушити синглетний стан димера на щаблях. З рис. 5.4 можна помітити, що фаза SB дійсно межує з синглет-димерною фазою на щаблях і замінює фазу QPM на фазовій діаграмі основного стану. 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 двоногій драбинки. Звідси випливає, що фаза SB виникає при помірних значеннях зовнішнього магнітного поля і, отже, призводить до наявності проміжного плато намагніченості на половині намагніченості насичення. Це цілком зрозуміло з рис. 5.5(a), 5.6(a) що драбинка Гайзенберга-Ізинга без

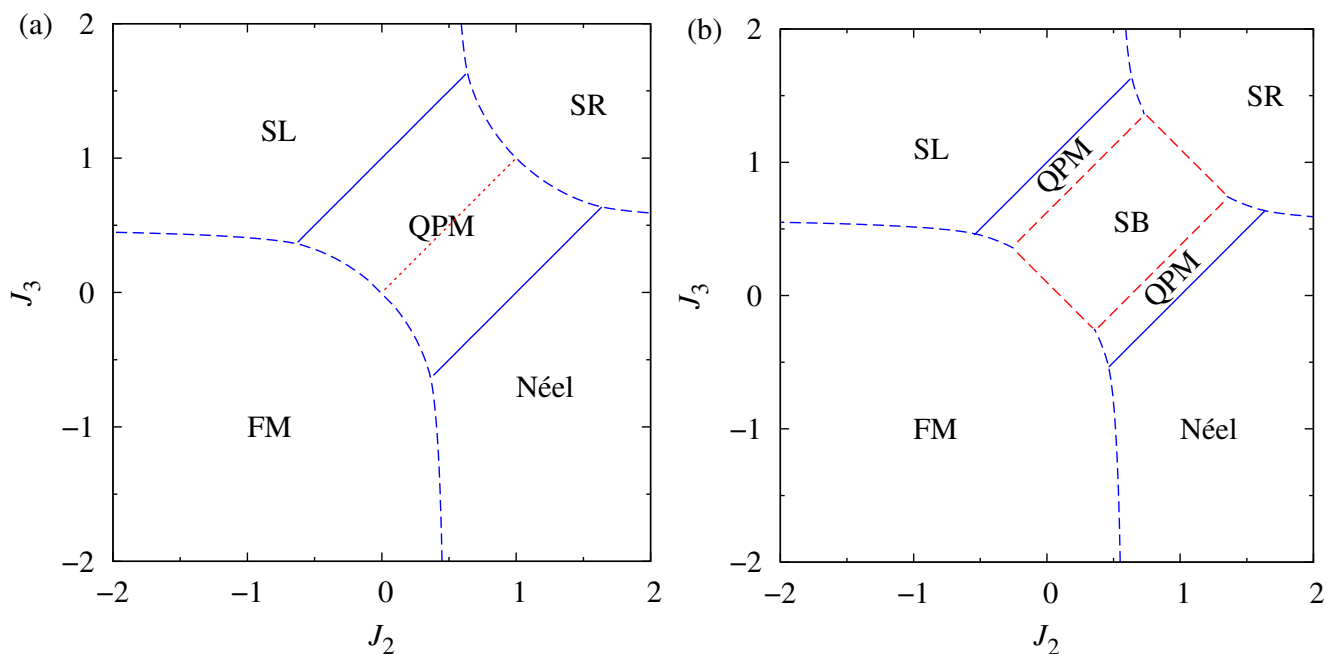


Рис. 5.4. Фазова діаграма основного стану двоногї драбинки Гайзенберґа-Ізинґа у площині $J_2 - J_3$ для $J_1 = 1$, $\Delta = 1$ і двох різних значень зовнішніх полів: (a) $h = 1.0$; (b) $h = 1.1$.

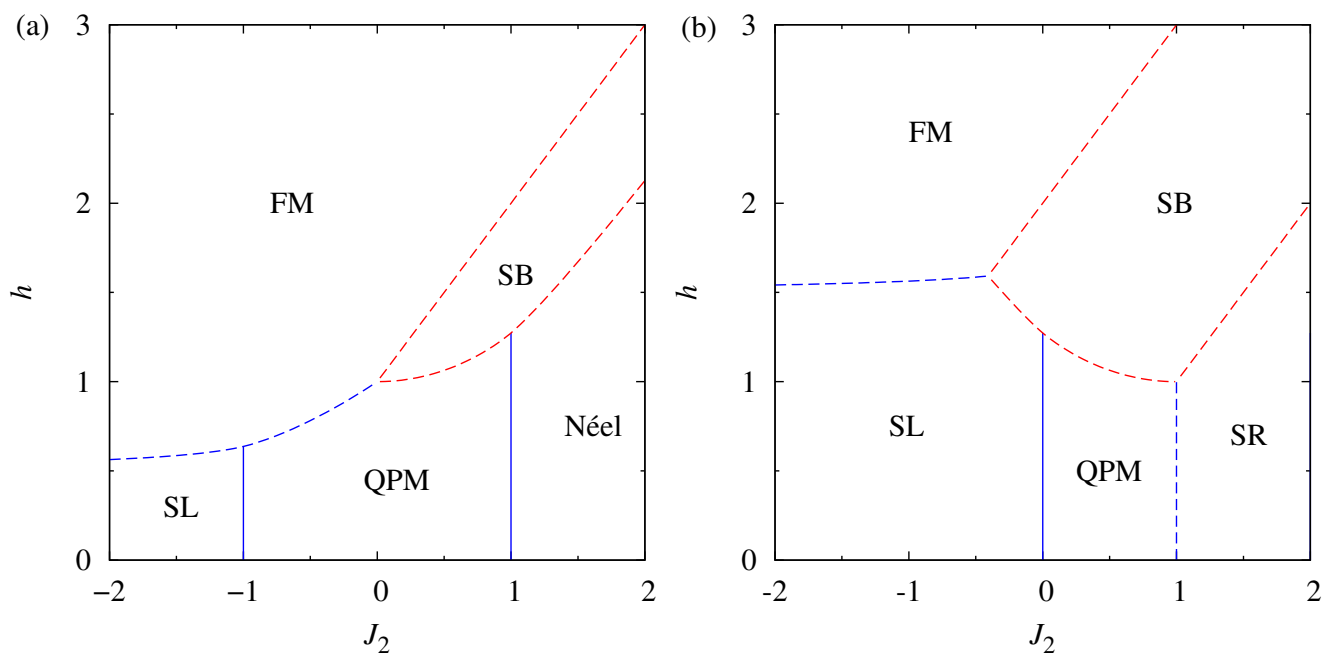


Рис. 5.5. Фазова діаграма основного стану двоногї драбинки Гайзенберґа-Ізинґа у площині $J_2 - h$ для $J_1 = 1$, $\Delta = 1$ і двох різних значень перехресних взаємодій: (a) $J_3 = 0$; (b) $J_3 = 1$.

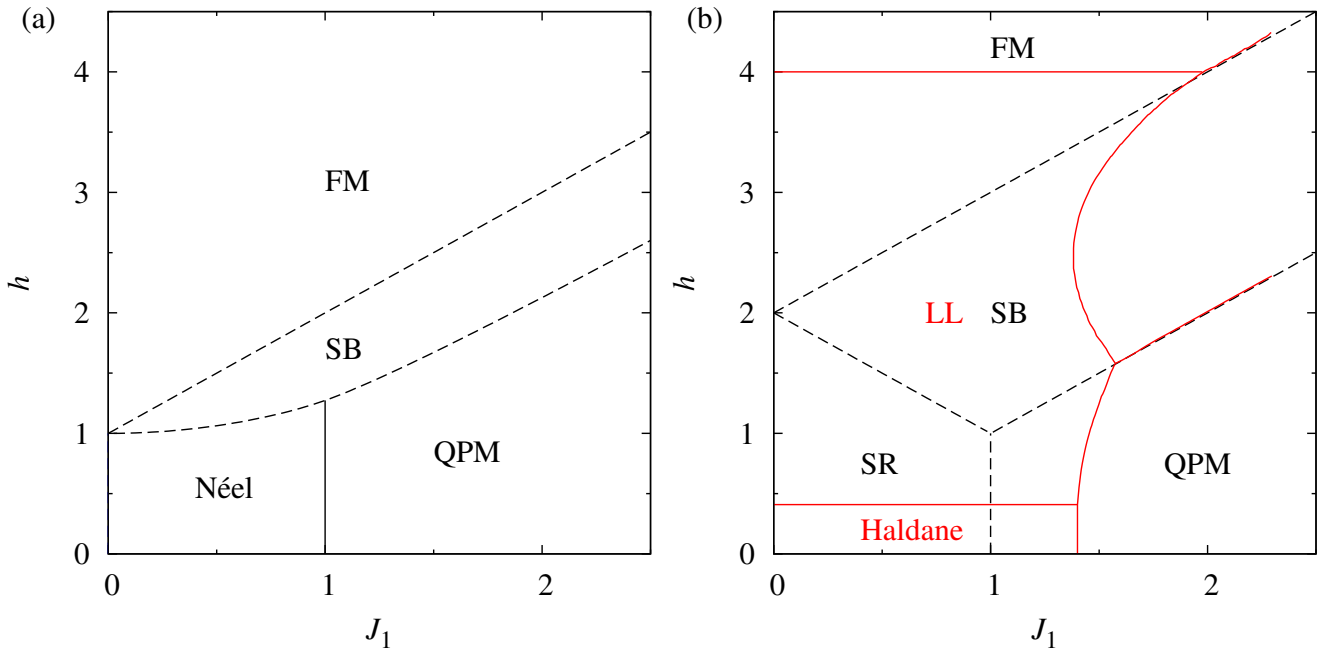


Рис. 5.6. Фазова діаграма основного стану двонової драбинки Гайзенберґа-Ізинґа у площині $J_1 - h$ для $J_2 = 1$, $\Delta = 1$ і двох різних значень перехресної взаємодії: (a) $J_3 = 0$; (b) $J_3 = 1$. Для порівняння, (b) зображає червоними лініями фазову діаграму двонової драбинки Гайзенберґа відтвореної зі статті [331].

фрустрованої діагональної взаємодії Ізинґа $J_3 = 0$ демонструє $1/2$ плато намагніченості лише для окремого випадку антиферромагнітної взаємодії Ізинґа всередині ланцюжка $J_2 > 0$. З іншого боку, плато дробової намагніченості, притаманне фазі SB, суттєво стабілізується фрустрацією, спричиненою ненульовою перехресною взаємодією Ізинґа $J_3 \neq 0$ і, отже, область плато може навіть поширюватися на відносно вузьку область ферромагнітної Ізинґової взаємодії $J_2 < 0$ (див. рис. 5.5(b)).

Слід зазначити, що аналогічний механізм виникнення плато намагніченості також було передбачено для спін- $\frac{1}{2}$ двонової драбинки Гайзенберґа за допомогою методів точної діагоналізації та DMRG [329, 331–334]. Тому завершимо наше дослідження порівнянням відповідних фазових діаграм основного стану двоногих драбинок Гайзенберґа-Ізинґа та Гайзенберґа за наявності зовнішнього магнітного поля, які наведені на рис. 5.6. Згідно з цим графіком, обидвом моделям притаманний однаковий процес намагнічування у границі сильного зв'язку взаємодії Гайзенберґа $J_1 \gtrsim 1.5$, де можна спостерігати два наступних індукованих полем пе-

реходи в такому порядку QPM-SB-FM, і, отже, намагніченість виявляє два різких стрибки при відповідних полях переходу. З іншого боку, принципові відмінності можна виявити у відповідному процесі намагнічення драбинок Гайзенберга-Ізинґа та Гайзенберга у границі слабкого зв'язку взаємодії J_1 . При малих полях квантова топологічна фаза Голдейна становить основний стан драбинки Гайзенберга на противагу до класичної фази SR, яка є основним станом драбинки Гайзенберга-Ізинґа при низьких полях. Крім того, драбинка Гайзенберга-Ізинґа все ще демонструє плато намагніченості, що відповідає фазі SB при проміжних значеннях магнітного поля в цьому просторі параметрів, тоді як у чистій Гайзенберговій драбинці можна спостерігати неперервне зростання намагніченості через наявність безщільної рідинної фази Латинджера при помірних полях. Нарешті, також варто відзначити, що поля насичення в бік феромагнітної фази також відрізняються для драбинок Гайзенберга-Ізинґа та Гайзенберга в границі слабкого зв'язку Гайзенбергової взаємодії на щаблях.

5.3. Точний розв'язок для тетраедричного ланцюжка

Частковим випадком розглянутою вище драбинки є спін-1/2 ланцюжок Ізинґа-Гайзенберга, який складається з тетраедрів зі спільними ребрами, що включають взаємодії Гайзенберга та Ізинґа. Як схематично показано на рис. 5.7(а), зв'язок Гайзенберга приписується всім спільним ребрам, які мають сусідні тетраедри, тоді як усі інші ребра схематично представляють взаємодію Ізинґа. Гамільтоніан спін-1/2 тетраедричного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберга визначається як

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N [J_x(\hat{\sigma}_{1,i}^x \hat{\sigma}_{2,i}^x + \hat{\sigma}_{1,i}^y \hat{\sigma}_{2,i}^y) + J_z \hat{\sigma}_{1,i}^z \hat{\sigma}_{2,i}^z + J_1(\hat{\sigma}_{1,i}^z + \hat{\sigma}_{2,i}^z)(\hat{\sigma}_{1,i+1}^z + \hat{\sigma}_{2,i+1}^z) - h(\hat{\sigma}_{1,i}^z + \hat{\sigma}_{2,i}^z)], \quad (5.27)$$

де $\hat{\sigma}_{\gamma,i}^\alpha$ позначає спін-1/2 оператор Паулі, верхній індекс $\alpha \in \{x, y, z\}$ позначає його просторову складову, а нижній індекс $\gamma = 1, 2$ визначає заданий ланцюжок (див. рис. 5.7(b)). Параметри J_x і J_z позначають просторово анізотропну XXZ взаємодію Гайзенберга, що виникає на ребрах, спільних для сусідніх тетраедрів,

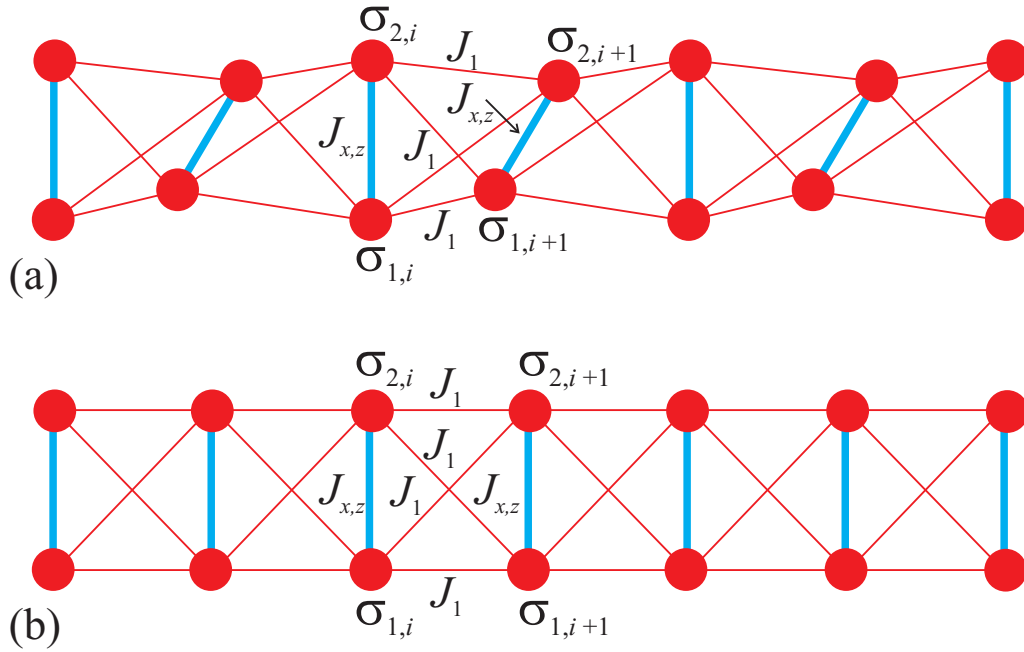


Рис. 5.7. (а) Схематичне зображення спін- $\frac{1}{2}$ тетраедричного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа. Товсті (сині) лінії представляють XXZ зв'язки Гайзенберґа (J_x , J_z), тоді як тонкі (червоні) лінії відповідають зв'язку Ізинґа J_1 ; (б) тетраедричний ланцюжок також можна розглядати як фрустровану двоногу драбинку з однаковими взаємодіями Ізинґа вздовж ланцюжків і діагоналей.

параметр J_1 позначає взаємодію Ізинґа, приєднану до всіх інших (не спільних) країв, а h — доданок Зеємана, пов'язаний з наявністю поздовжнього магнітного поля. Надалі наша увага буде обмежена лише окремим випадком моделі з антиферромагнітними взаємодіями $J_x > 0$, $J_z > 0$ і $J_1 > 0$, де виникають найцікавіші фізичні особливості, такі як спінова фрустрація, плато намагніченості тощо.

Як було показано раніше [335], досить зручно переписати гамільтоніан (5.27) за допомогою просторових складових повного спіну $\hat{S}_i^\alpha = \hat{\sigma}_{1,i}^\alpha + \hat{\sigma}_{2,i}^\alpha$ на ребрі. Використавши спінові тотожності $(\hat{S}_i^\alpha)^2 = \frac{1}{2} + 2\hat{\sigma}_{1,i}^\alpha \hat{\sigma}_{2,i}^\alpha$, гамільтоніан (5.27) для тетраедричного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа набуває такого вигляду:

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{i=1}^N \left[J_1 \hat{S}_i^z \hat{S}_{i+1}^z + \frac{J_x}{2} \hat{S}_i^2 + \frac{J_z - J_x}{2} (\hat{S}_i^z)^2 - h \hat{S}_i^z \right] - \frac{N}{4} (2J_x + J_z). \quad (5.28)$$

Гамільтоніан (5.28) повністю виражається через повний спіновий момент \hat{S}_i^2 та його z -просторову компоненту \hat{S}_i^z , яка відповідає збереженим величинам із чітко визначеними квантовими числами $S_i(S_i + 1)$ та $S_i^z = -S_i, -S_i + 1, \dots, S_i$ відпо-

відно. Звідси випливає, що гамільтоніан вихідної моделі (5.27) відображається у гамільтоніан (5.28) деякої класичної моделі спінового ланцюжка, оскільки квантове спінове число для повного спіна на спільному ребрі дорівнює $S_i = 0$ або 1. Цілком очевидно з рівняння (5.28), що взаємодія Ізинга J_1 і зовнішнє магнітне поле h безпосередньо визначають ефективну взаємодію найближчих сусідів і ефективне поле у моделі з композитними спінами. Крім того, XXZ взаємодія Гайзенберга визначає ефективну одноіонну анізотропію $\frac{J_z - J_x}{4}$, що діє в триплетному секторі композитного спіну $S_i = 1$, а також зміщує енергію між синглетним та триплетними секторами. Враховуючи все це, гамільтоніан спін-1/2 тетраедричного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга можна повністю діагоналізувати та переписати у вигляді

$$\mathcal{H} = \mathcal{H}_0 + \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \quad (5.29)$$

який розбивається на доданок постійної енергії $\mathcal{H}_0 = -\frac{N}{4}(2J_x + J_z)$ і суму симетричних виразів \mathcal{H}_i , що включають лише власні значення двох наступних складених спінів S_i та S_{i+1}

$$\begin{aligned} \mathcal{H}_i = & J_1 S_i^z S_{i+1}^z + \frac{J_x}{4} [S_i(S_i + 1) + S_{i+1}(S_{i+1} + 1)] \\ & + \frac{J_z - J_x}{4} [(S_i^z)^2 + (S_{i+1}^z)^2] - \frac{h}{2} (S_i^z + S_{i+1}^z). \end{aligned} \quad (5.30)$$

Слід зазначити, що діагоналізований гамільтоніан (5.30) ланцюжка з композитними спінами може бути прямо використаний для отримання усіх основних станів, загального спектру збудження, і, крім того, це також передбачає можливість застосування методу матриці переносу [321] для отримання точних результатів для термодинамічних величин. Підставляючи ефективний гамільтоніан (5.29) у визначення статистичної суми, справді отримуємо співвідношення для статистичної суми спін-1/2 тетраедричного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} e^{-\beta \hat{\mathcal{H}}} = e^{-\beta \mathcal{H}_0} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N e^{-\beta \mathcal{H}_i} \quad (5.31)$$

$$= e^{-\beta\mathcal{H}_0} \sum_{\{S_i\}} \prod_{i=1}^N \mathbf{T}(S_i, S_i^z; S_{i+1}, S_{i+1}^z) = e^{-\beta\mathcal{H}_0} \text{Tr } \mathbf{T}^N,$$

де $\beta = 1/(k_B T)$, k_B — постійна Больцмана, T — абсолютна температура, сума $\sum_{\{S_i\}}$ пробігає всі можливі значення повного набору квантових спінових чисел $\{S_i\}$ і вираз $\mathbf{T}(S_i, S_i^z; S_{i+1}, S_{i+1}^z)$ позначає матрицю переносу

$$\begin{aligned} \mathbf{T}(S_i, S_i^z; S_{i+1}, S_{i+1}^z) &= \langle S_i, S_i^z | e^{-\beta\mathcal{H}_i} | S_{i+1}, S_{i+1}^z \rangle \\ &= \begin{pmatrix} 1 & xyw & x^2 & xyw^{-1} \\ xyw & x^2 y^2 z w^2 & x^3 y w & x^2 y^2 z^{-1} \\ x^2 & x^3 y w & x^4 & x^3 y w^{-1} \\ xyw^{-1} & x^2 y^2 z^{-1} & x^3 y w^{-1} & x^2 y^2 z w^{-2} \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (5.32)$$

з $x = e^{-\frac{\beta J_x}{4}}$, $y = e^{-\frac{\beta J_z}{4}}$, $z = e^{-\beta J_1}$ і $w = e^{\frac{\beta h}{2}}$. Тепер достатньо знайти найбільше власне значення матриці переносу (5.32), щоб отримати точний вираз для статистичної суми, вільної енергії та загальної термодинаміки. Одне з чотирьох власних значень матриці переносу (5.32) дорівнює нулю ($\lambda_0 = 0$), оскільки її перший і третій рядки є лінійно залежними, а інші три власні значення можна знайти, розв'язуючи кубічне рівняння

$$\lambda^3 - a\lambda^2 + b\lambda + c = 0 \quad (5.33)$$

з коефіцієнтами

$$\begin{aligned} a &= 1 + e^{-\beta J_x} + 2e^{-\beta J_1 - \frac{\beta}{2}(J_x + J_z)} \cosh(\beta h), \\ b &= 2(-1 + e^{-\beta J_1})(1 + e^{-\beta J_x})e^{-\frac{\beta}{2}(J_x + J_z)} \cosh(\beta h) - 2e^{-\beta(J_x + J_z)} \sinh(2\beta J_1), \\ c &= 2(1 + e^{-\beta J_x})e^{-\beta(J_x + J_z)} [\sinh(2\beta J_1) - \sinh(\beta J_1)]. \end{aligned} \quad (5.34)$$

Дотримуючись стандартної процедури, можна легко знайти ще три власні значення $\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ матриці переносу як корені кубічного рівняння (5.33). У термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$ вільна енергія на елементарну комірку визначається лише найбільшим власним значенням $\lambda_{\max} = \max\{\lambda_1, \lambda_2, \lambda_3\}$ серед трьох коренів кубічного рівняння (5.33)

$$f = -\beta^{-1} \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{N} \ln \mathcal{Z} = -\frac{2J_x + J_z}{4} - \beta^{-1} \ln \lambda_{\max}. \quad (5.35)$$

Одновузлову намагніченість, нормовану відносно її значення насичення ($m_s = 1/2$), можна отримати диференціюванням вільної енергії відносно зовнішнього магнітного поля, що еквівалентно диференціюванню логарифма найбільшого власного значення матриці перенесу, який легко виконати за допомогою рівняння (5.33)

$$\frac{m}{m_s} = -\frac{\partial f}{\partial h} = \frac{\partial \ln \lambda_{\max}}{\partial(\beta h)} = \frac{a_h \lambda_{\max} - b_h}{3\lambda_{\max}^2 - 2a\lambda_{\max} + b}. \quad (5.36)$$

Тут ми запровадили нові позначення

$$\begin{aligned} a_h &= 2e^{-\beta J_1 - \frac{\beta}{2}(J_x + J_z)} \sinh(\beta h), \\ b_h &= 2(-1 + e^{-\beta J_1})(1 + e^{-\beta J_x})e^{-\frac{\beta}{2}(J_x + J_z)} \sinh(\beta h). \end{aligned} \quad (5.37)$$

Інші важливі термодинамічні величини, як-от ентропія чи питома теплоємність, також можуть бути легко обчислені з точного виразу (5.35) для приведеної вільної енергії, використовуючи стандартні термодинамічні співвідношення

$$S = -\frac{\partial f}{\partial T}, \quad C = T \frac{\partial S}{\partial T}. \quad (5.38)$$

Для простоти надалі увагу буде приділено лише окремому випадку досліджуваного спінового ланцюжка з ізотропною взаємодією Гайзенберга $J_x = J_z = J$ на ребрі, який ілюструє всі характерні особливості більш загальної моделі з анізотропною XXZ взаємодією $J_x \neq J_z$.

5.3.1. Фазова діаграма основного стану

Діагональну форму гамільтоніана (5.30) можна досить просто використати для отримання всіх можливих основних станів тетраедричного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга зі спіном $\frac{1}{2}$. В результаті можна виявити лише чотири різні основні стани: стан синглетних димерів (SD), суперантиферромагнітний (SA) стан, стан шахового зв'язку (SB) і ферромагнітний (FM) стан, які однозначно задаються наступними власними векторами

$$|\text{SD}\rangle = \prod_{i=1}^N \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle - |\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle),$$

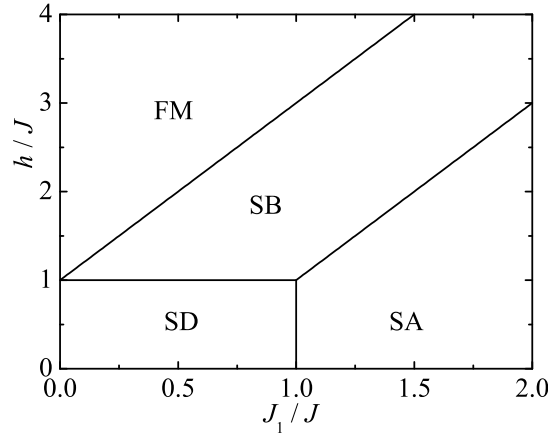


Рис. 5.8. Фазова діаграма основного стану спін- $\frac{1}{2}$ тетраедричного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа в площині $J_1/J - h/J$ для ізотропного зв'язку Гайзенберґа ($J_x = J_z = J$), який включає стан синглетних димерів (SD) на щаблях, суперантиферомагнітний (SA), шаховий зв'язок (SB) і феромагнітний (FM) основні стани.

$$\begin{aligned}
 |\text{SA}\rangle &= \prod_{i=1}^{N/2} |\uparrow_{1,2i-1}\uparrow_{2,2i-1}\rangle \otimes |\downarrow_{1,2i}\downarrow_{2,2i}\rangle, \\
 |\text{SB}\rangle &= \prod_{i=1}^{N/2} |\uparrow_{1,2i-1}\uparrow_{2,2i-1}\rangle \otimes \frac{|\uparrow_{1,2i}\downarrow_{2,2i}\rangle - |\downarrow_{1,2i}\uparrow_{2,2i}\rangle}{\sqrt{2}}, \\
 |\text{FM}\rangle &= \prod_{i=1}^N |\uparrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle.
 \end{aligned} \tag{5.39}$$

Фазова діаграма основного стану, що включає всі доступні основні стани, зображена на рис. 5.8. Стан SD з усіма зв'язками Гайзенберґа (на щаблях) у синглетному стані стає основним у просторі параметрів, обмеженим такими умовами: $J_1 < J$ і $h < J$. Якщо умови $J_1 > J$ і $h < 2J_1 - J$ виконуються, основний стан утворюється двократно виродженим SA впорядкуванням спінів з регулярним чергуванням повністю поляризованих смуг Гайзенберґа в протилежних напрямках. Очевидно, що сумарна намагніченість основних станів SD і SA дорівнює нулю. Поки виконуються обернені умови $J_1 < J$, $h > J$ або $J_1 > J$, $h > 2J_1 - J$, двократно вироджений стан SB з регулярним чергуванням синглетних димерів і поляризованих триплетів виникає в результаті індукованого полем переходу з основного стану SD або SA. Згідно з цим, спін- $\frac{1}{2}$ тетраедричний ланцюжок Ізинґа-Гайзенберґа повинен

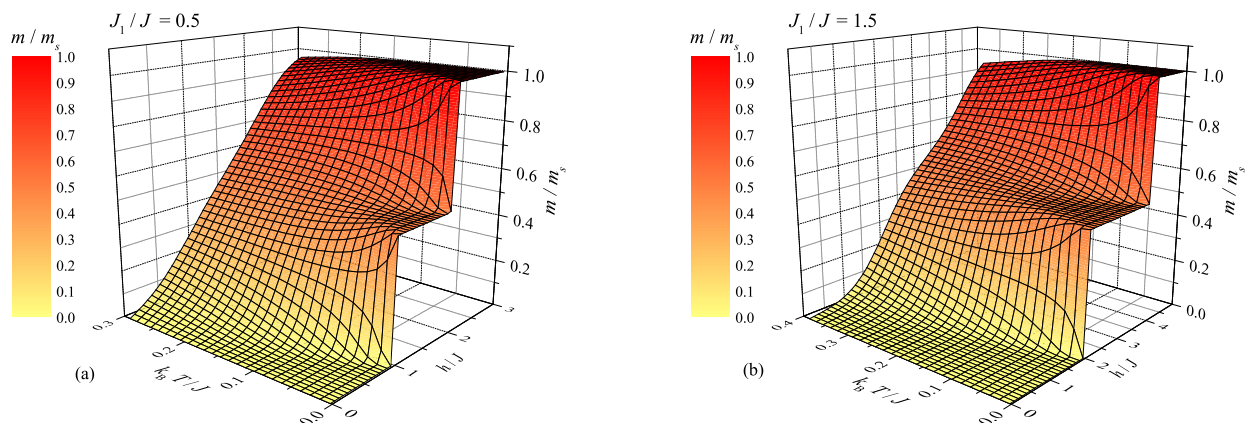


Рис. 5.9. Тривимірний графік намагніченості, нормований відносно значення насичення від температури та магнітного поля для ізотропної взаємодії Гайзенберга ($J_x = J_z = J$) і двох різних значень співвідношення взаємодії: (a) $J_1/J = 0.5$; (b) $J_1/J = 1.5$.

демонструвати на кривій намагніченості при нульовій температурі проміжне плато на половині намагнічення насичення через магнітну структуру з порушенням симетрії основного стану SB, в якому половина щаблів Гайзенберга поляризована зовнішнім магнітним полем. Нарешті, модель, що досліджується, демонструє перехід до повністю поляризованого основного стану FM, як тільки досягається поле насичення $h = 2J_1 + J$.

Крім того, макроскопічне виродження на межах між різними фазами може бути виявлено на відповідних індукованих полем переходах. На межі SA-SB кожен другий щабель може залишатися у двох різних станах (синглетному та повністю поляризованому), що призводить до макроскопічного виродження $2^{N/2}$. Вироджені стани на границях SD-SB і SB-FM можуть бути описані ефективною одновимірною моделлю жорсткого димера з використанням процедури аналогічної до описаній в роботі [86]. Як наслідок, макроскопічне виродження становить $((1 + \sqrt{5})/2)^N$ для цього випадку. Воно призводить до залишкової ентропії основного стану, яка буде більш детально розглянута в розділі 5.3.3.

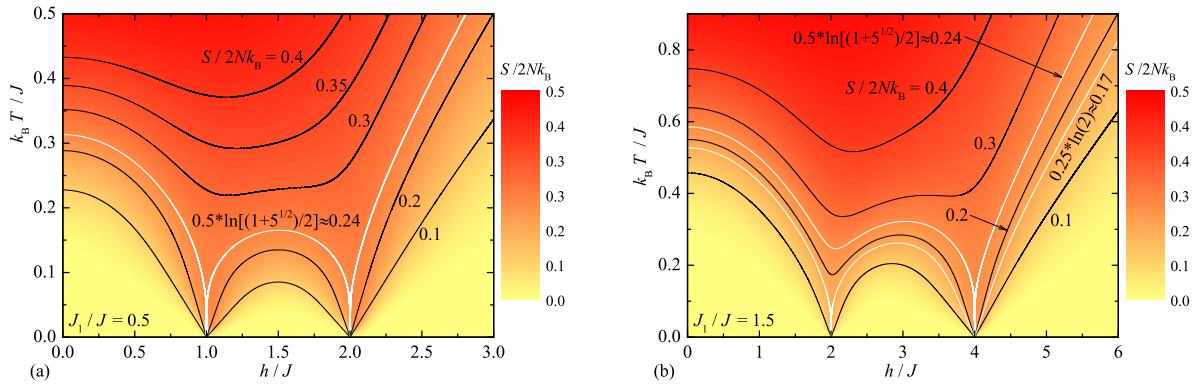


Рис. 5.10. Діаграма інтенсивності у площині температура-магнітне поле: (а) $J_1/J = 0.5$; (б) $J_1/J = 1.5$. Лінії позначають ізентропи для різних значень ентропії. Білі лінії відповідають окремим випадкам з найбільшим магнетокалоричним ефектом.

5.3.2. Процес намагнічування

Перейдемо до детального розгляду процесу намагнічення, щоб перевірити наявність проміжного плато на половині намагніченості насичення, що відповідає б індукованій полем стабілізації основного стану SB. На рис. 5.9 показано тривимірний графік намагніченості як функції безрозмірного магнітного поля та температури для двох альтернативних варіантів співвідношення взаємодії $J_1/J = 0.5$ і 1.5 , рухаючи спіновий ланцюжок у межі нульового поля до основного стану SD і SA відповідно. Як можна бачити, криві низькотемпературної намагніченості чітко свідчать про наявність половинного плато намагніченості, незалежно від того, чи є стан SD або SA відповідним основним станом нульового поля. Східчаста крива намагніченості з крутим збільшенням намагніченості, що спостерігається поблизу відповідних перехідних полів, зазвичай згладжується підвищенням температури, тоді як термічно викликане згладжування відбувається швидше для квантового стану SD, ніж для класичного, але подвійно виродженого стану SA.

5.3.3. Магнітне охолодження

Нещодавно було продемонстровано, що кілька фрустрованих спінових систем можуть проявляти посилений магнетокалоричний ефект під час адіабати-

чного розмагнічування, що може мати практичне значення для низькотемпературного магнітного охолодження [336–339]. У зв'язку з цим, дослідимо також адіабатичне розмагнічування спінів-1/2 тетраедричного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга в адіабатичних (ізоентропійних) умовах. Рисунок 5.10 ілюструє типові ізоентропійні зміни температури при зміні зовнішнього магнітного поля для двох різних сценаріїв намагніченості, розглянутих раніше. Послідовність двох індукованих полем переходів FM→SB→SD при зменшенні магнітного поля відображається у відповідних змінах температури, показаних на рис. 5.10(a). З цього рисунка цілком очевидно, що найбільш помітний магнетокалоричний ефект можна виявити, якщо ентропію вибрано достатньо близько до значення $S = Nk_B \ln\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$, за якого температура нескінченно швидко зникає, коли зовнішнє поле наближається до одного з двох перехідних полів. Інший окремий випадок, показаний на рис. 5.10(b), відображає іншу можливу послідовність двох індукованих полем переходів FM→SB→SA, яка демонструє посилений магнетокалоричний ефект за умови збереження ентропії або близько до значення $S = Nk_B \ln\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$ або $\frac{1}{2} \ln(2)$. Попереднє значення $S = Nk_B \ln\left(\frac{1+\sqrt{5}}{2}\right)$ забезпечує ефективне охолодження в околі переходу FM→SB, тоді як останнє значення $S = Nk_B \frac{1}{2} \ln(2)$ забезпечує ефективне охолодження поблизу переходу SB→SA. Оптимальні значення ентропії для ефективного охолодження узгоджуються з відповідними виродженнями основного стану, про які повідомлялося раніше для відповідних індукованих полем переходів.

5.4. Модель магнетоелектрика на драбинці

Точно розв'язну модель двонової драбинки запропоновану у цьому розділі можна поширити на ширший клас задач. Зокрема, тут ми розглядаємо магнетоелектричний ефект на базі цієї моделі.

Хоча ранні дослідження магнетоелектричного ефекту (МЕЕ) відносяться до 19-го століття [340], це явище викликає новий дослідницький інтерес головним чином через його широкий потенціал застосування в сучасних технологіях [341].

Залежність намагніченості від електричного поля і електричної поляризації від магнітного поля можна описати кількома альтернативними механізмами. Відповідно до механізму Кацури-Нагаоси-Балацького (KNB) [78] діелектрична поляризація $\mathbf{p}_{i,j}$ пов'язана зі спіновим струмом $\mathbf{j}_{i,j}$ між парою сусідніх спінів \mathbf{s}_i і \mathbf{s}_j таким чином:

$$\mathbf{p}_{i,j} \propto \mathbf{e}_{i,j} \times \mathbf{j}_{i,j}, \quad (5.40)$$

де $\mathbf{e}_{i,j}$ — одиничний вектор, що вказує від i -го до j -го вузла ґратки, а спіновий струм $\mathbf{j}_{i,j} \propto \mathbf{s}_i \times \mathbf{s}_j$ пропорційний антисиметричному члену взаємодії Дзялошинського-Морія [69, 70] з припущенням, що два сусідні спіни пов'язані через ізотропну обмінну взаємодію.

Отже, розглянемо квантову спін-1/2 драбинку Гайзенберґа-Ізинґа, визначену через гамільтоніан:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[J_H \mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i} + J_I (s_{1,i}^z s_{1,i+1}^z + s_{2,i}^z s_{2,i+1}^z) - h (s_{1,i}^z + s_{2,i}^z) - E (s_{1,i}^y s_{2,i}^x - s_{1,i}^x s_{2,i}^y) \right], \quad (5.41)$$

де $\mathbf{s}_{l,i} \equiv (s_{l,i}^x, s_{l,i}^y, s_{l,i}^z)$ представляє спін-1/2 оператор для i -го вузла l -го ланцюжка ($i = 1, 2, \dots, N; l = 1, 2$), параметр $J_H > 0$ позначає антиферомагнітну взаємодію Гайзенберґа між спінами на одному щаблі, $J_I > 0$ ($J_I < 0$) позначає антиферомагнітну (феромагнітну) взаємодію Ізинґа всередині ланцюжків, а N позначає загальну кількість щаблів драбинки за періодичних граничних умов $\mathbf{s}_{l,N+1} \equiv \mathbf{s}_{l,1}$. Нарешті, останні два члени в рівнянні (5.41) представляють стандартний член Зеємана, пов'язаний з магнітним полем h , прикладеним уздовж осі z , і енергією системи в електричному полі E , прикладеним уздовж осі y , що впливає на відповідну складову діелектричної поляризації (5.40). Припустивши, що щаблі драбинки вирівняні вздовж осі x у просторі, тобто $\mathbf{e}_{(1,i),(2,i)} = (1, 0, 0)$ у рівнянні (5.40), діелектрична поляризація $p_i^y = s_{1,i}^y s_{2,i}^x - s_{1,i}^x s_{2,i}^y$ відноситься до i -ого щабля. Зауважимо, що діелектричний дипольний момент створюється лише на щаблях Гайзенберґа, тоді як зв'язки Ізинґа вздовж гілок не виявляють жодного магнето-електричного зв'язку.

Взаємодію Дзялошинського-Морія, пов'язану з електричним полем, можна виключити з гамільтоніана (5.41), виконавши локальне перетворення обертання спіна навколо осі z на певний кут $\varphi = \tan^{-1}(E/J_H)$ [260]. В результаті отримуємо гамільтоніан драбинки Гайзенберга-Ізинґа зі спіном $1/2$ з ефективною XXZ взаємодією на щаблях і взаємодією Ізинґа вздовж ланцюжків:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left[\sqrt{J_H^2 + E^2} (s_{1,i}^x s_{2,i}^x + s_{1,i}^y s_{2,i}^y) + J_H s_{1,i}^z s_{2,i}^z + J_I (s_{1,i}^z s_{1,i+1}^z + s_{2,i}^z s_{2,i+1}^z) - h (s_{1,i}^z + s_{2,i}^z) \right], \quad (5.42)$$

який можна розглядати як окремий випадок фрустрованої драбинки Гайзенберга-Ізинґа спіном $1/2$, точно розв'язаної вище. Щоб отримати строгий розв'язок для основного стану досліджуваної моделі, спочатку визначимо власні стани зв'язків XXZ на щаблях (див. розділ 5.1), а потім отримаємо гамільтоніан (5.42) у псевдоспіновому представленні:

$$\mathcal{H} = \sum_{i=1}^N \left\{ 2J_I [n_i n_{i+1} + (1 - n_i)(1 - n_{i+1})] \tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x + \sqrt{J_H^2 + E^2} (1 - n_i) \tilde{s}_i^z - 2h n_i \tilde{s}_i^x + \frac{J_H}{4} (2n_i - 1) \right\}. \quad (5.43)$$

5.4.1. Магнетоелектричний ефект за відсутності магнітного поля

Енергія основного стану спін- $1/2$ драбинки Гайзенберга-Ізинґа у нульовому полі ($h = 0$) слідує з формули для енергії основного стану квантового ланцюжка Ізинґа [322] (див також формулу (5.13)):

$$\mathcal{E}_{GS} \equiv \frac{1}{N} \langle \mathcal{H} \rangle = -\frac{J_H}{4} - \frac{\sqrt{J_H^2 + E^2} + |J_I|}{\pi} \mathbf{E}(a), \quad (5.44)$$

де $\mathbf{E}(a) = \int_0^{\pi/2} d\phi \sqrt{1 - a^2 \sin^2 \phi}$ – повний еліптичний інтеграл другого роду з $a^2 = \frac{4|\lambda|}{(1+|\lambda|)^2}$ і $\lambda = \frac{J_I}{\sqrt{J_H^2 + E^2}}$. Енергія основного стану (5.44) має сингулярність при $|\lambda| = 1$ ($|E_c| = \sqrt{J_I^2 - J_H^2}$), що відповідає квантовому фазовому переходу між квантовою парамагнітною (QPM) фазою, що виникає для $|\lambda| \leq 1$ і фазою Нееля або стрічко-подібне впорядкування вздовж ланцюжків (SL), що виникає при $|\lambda| > 1$, залежно

від того, чи $J_I > 0$ або $J_I < 0$ відповідно. У той час як нульовий і стрічкоподібний магнітні порядки є цілком аналогічними і можуть бути охарактеризовані за допомогою ненульової шахової намагніченості, цей параметр порядку стає нульовим у неупорядкованій фазі QPM:

$$m_s^z \equiv \frac{1}{2} \langle |s_{1,i}^z - s_{2,i}^z| \rangle = \begin{cases} \frac{1}{2} \left(1 - \frac{1}{\lambda^2}\right)^{1/8} & \text{якщо } |\lambda| > 1 \\ 0 & \text{якщо } |\lambda| \leq 1 \end{cases}. \quad (5.45)$$

Очевидно, що намагніченість у шаховому порядку m_s^z демонструє стрімкий сте-

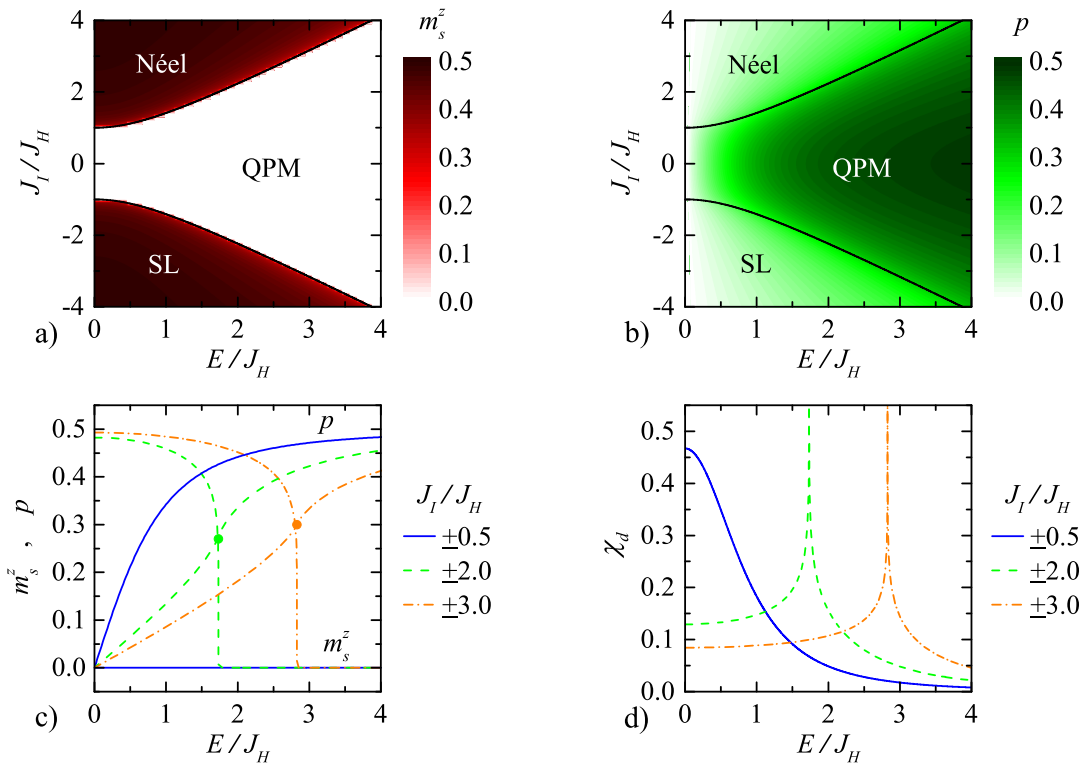


Рис. 5.11. Градієнтне зображення антиферромагнітного параметра порядку намагніченості m_s^z (a) і електричної поляризації p (b) як фазової діаграми основного стану в площині $E/J_H - J_I/J_H$ разом з залежністю від електричного поля антиферромагнітного параметра порядку m_s^z , електричної поляризації p (c) та діелектричної сприйнятливості χ_d (d) для співвідношень взаємодії $J_I/J_H = \pm 0.5, \pm 2.0, \pm 3.0$.

пневий спад із критичним показником типу Ізинга $\beta = 1/8$ при квантовому фазовому переході $|\lambda| = 1$ (див. рис. 5.11(a), (c)). На противагу цьому, поляризація діелектрика визначається формулою:

$$p \equiv \langle p_i^y \rangle = \frac{1}{2\pi} \frac{E}{\sqrt{J_H^2 + E^2}} [(1+|\lambda|)\mathbf{E}(a) + (1-|\lambda|)\mathbf{K}(a)], \quad (5.46)$$

де $\mathbf{K}(a) = \int_0^{\pi/2} d\phi (1 - a^2 \sin^2 \phi)^{-1/2}$ — повний еліптичний інтеграл першого роду. Формула (5.46) передбачає більш плавну зміну діелектричної поляризації лише з сингулярністю слабкого типу $|p - p_c| \sim (E - E_c) \ln |E - E_c|$ при перетині відповідної фазової межі основного стану (див. рис. 5.11(b), (c)). Крім того, зауважимо, що діелектрична поляризація набагато вища в непорядкованій фазі QPM, ніж у впорядкованих фазах Нееля і SL, про що свідчать результати показані на рис. 5.11(b). Слабка сингулярність p у квантовій критичній точці (кружок на рис. 5.11(c)) більш помітно підтверджується через логарифмічну розбіжність діелектричної сприйнятливості $\chi_d = \frac{p}{\partial E} \sim -\ln |E - E_c|$ при критичному електричному полі E_c , як показано на рис. 5.11(d).

5.4.2. Магнетоелектричний ефект у магнітному полі

Окрім розглянутих вище фаз, ще два основні стани можуть виникнути через ненульове магнітне поле ($h \neq 0$). При досить високих магнітних полях можна виявити класичну феромагнітну (FM) фазу, яка характеризується:

$$\mathcal{E}_{\text{FM}} = \frac{J_H}{4} + \frac{J_I}{2} - h; \quad m_s^z = 0; \quad p = 0; \quad \chi_d = 0. \quad (5.47)$$

Іншим випадком є фаза шахового зв'язку (SB) з регулярним чергуванням синглетного та поляризованого триплетного станів, яка характеризується

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{\text{SB}} &= -\frac{1}{4} \sqrt{J_H^2 + E^2} - \frac{h}{2}; \quad m_s^z = \frac{1}{4}; \\ p &= \frac{1}{4} \frac{E}{\sqrt{J_H^2 + E^2}}; \quad \chi_d = \frac{1}{4} \frac{J_H^2}{(J_H^2 + E^2)^{3/2}}, \end{aligned} \quad (5.48)$$

може з'являтися при помірних магнітних полях за умови, що зв'язок Ізинґа всередині ланцюжка має антиферомагнітну природу $J_I > 0$. Типова фазова діаграма основного стану спин-1/2 драбинки Гайзенберґа-Ізинґа із феромагнітним зв'язком Ізинґа в ланцюжку проілюстрована на рис. 5.12 у вигляді графіків намагніченості при шаховому порядку m_s^z (рис. 5.12(a)) та діелектричної поляризації p (рис. 5.12(b)) у площині $E/J_H - h/J_H$. Очевидно, що рис. 5.12(a), (b) вказують на кон-

курентний характер магнітного та діелектричного спінових порядків, коли посилення діелектричної поляризації супроводжується зменшенням шахової намагніченості або навпаки.

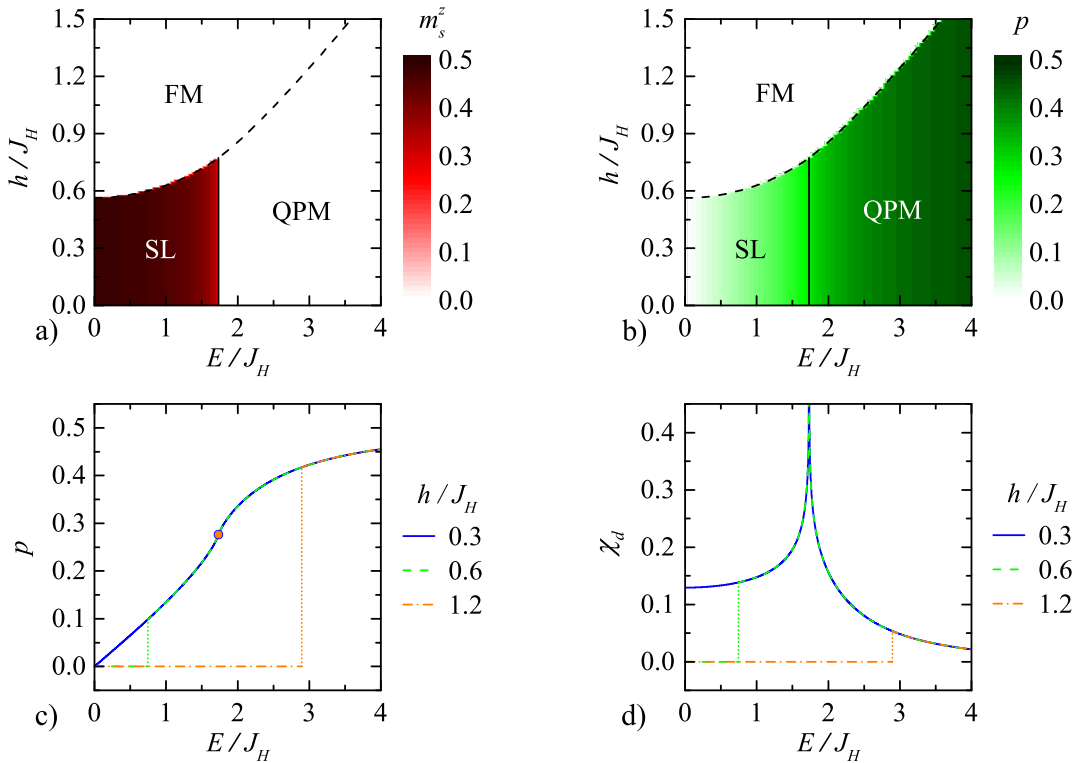


Рис. 5.12. Градієнтне зображення антиферромагнітного параметра порядку намагніченості m_s^z (a) і діелектричної поляризації p (b) як фазової діаграми основного стану в площині $E/J_H - h/J_H$ разом з залежністю від електричного поля діелектричної поляризації p (c) та сприйнятливості χ_d (d) для співвідношень взаємодії $J_I/J_H = -2$ і три різні магнітні поля $h/J_H = 0.3, 0.6, 1.2$.

Крім того, рис. 5.12(c), (d) показують кілька типових варіацій діелектричної поляризації та сприйнятливості в області фазових переходів першого і другого роду, керованих зовнішніми електричним та магнітним полями. Для достатньо низьких магнітних полів (наприклад, $h/J_H = 0.3$) поляризація діелектрика виявляє неперервне зростання зі слабкою сингулярністю на квантовому фазовому переході між фазами SL і QPM (заповнене коло на рис. 5.12c), при якому діелектрична сприйнятливість розбігається логарифмічно, як показано на рис. 5.12(d). На противагу цьому, діелектрична поляризація та сприйнятливість можуть демонструвати різкі стрибки, пов'язані з фазовим переходом першого роду між фазами

FM і SL при помірних магнітних полях (наприклад, $h/J_H = 0.6$) до досягнення квантового фазового переходу, керованого електричним полем.

Для порівняння типова фазова діаграма основного стану спін-1/2 драбинки Гайзенберга-Ізинга з антиферромагнітним зв'язком Ізинга вздовж ланцюжків зображена на рис. 5.13 у вигляді графіків густини шахової намагніченості m_s^z (рис. 5.13(a)) та діелектричної поляризації p (рис. 5.13(b)) у площині $E/J_H - h/J_H$. Очевидно, основна якісна відмінність від попереднього випадку полягає в наявності фази SB при помірних магнітних полях. Завдяки цьому факту можна виявити набагато більшу різноманітність варіацій діелектричної поляризації та сприйнятливості електричного поля, як показано на рис. 5.13(c), (d). При достатньо низьких магнітних полях (наприклад, $h/J_H = 1.0$) поляризація діелектрика демонструє плавне неперервне зростання при посиленні електричного поля зі слабкою сингулярністю у відповідній квантовій критичній точці (символи на рис. 5.13(c)), що стає більш очевидним через логарифмічну розбіжність діелектричної сприйнятливості (див. рис. 5.13(d)). Навпаки, можна виявити нетипову залежність поляризації діелектрика від електричного поля з одним або двома стрибками, які відносяться до фазових переходів першого роду, викликаних зовнішнім електричним полем при помірних і сильних магнітних полях (наприклад, $h/J_H = 2.1, 2.5$ та 3.1).

5.5. Висновки

Двоногу драбинку Гайзенберга-Ізинга було вивчено в рамках строгого підходу, врахувавши, що z -проекція повного спіну на її щаблях є збереженою величиною. За допомогою псевдоспінового представлення станів зв'язку ми довели точну відповідність між досліджуваною моделлю та деякою узагальненою моделлю квантового спін-1/2 ланцюжка Ізинга з композитними спінами в ефективному поздовжньому та поперечному полях. Ми також знайшли унітарне перетворення, яке відтворює аналогічне відображення між моделями. У той час як представлення станів на зв'язках має просту фізичну інтерпретацію, унітарне перетворення

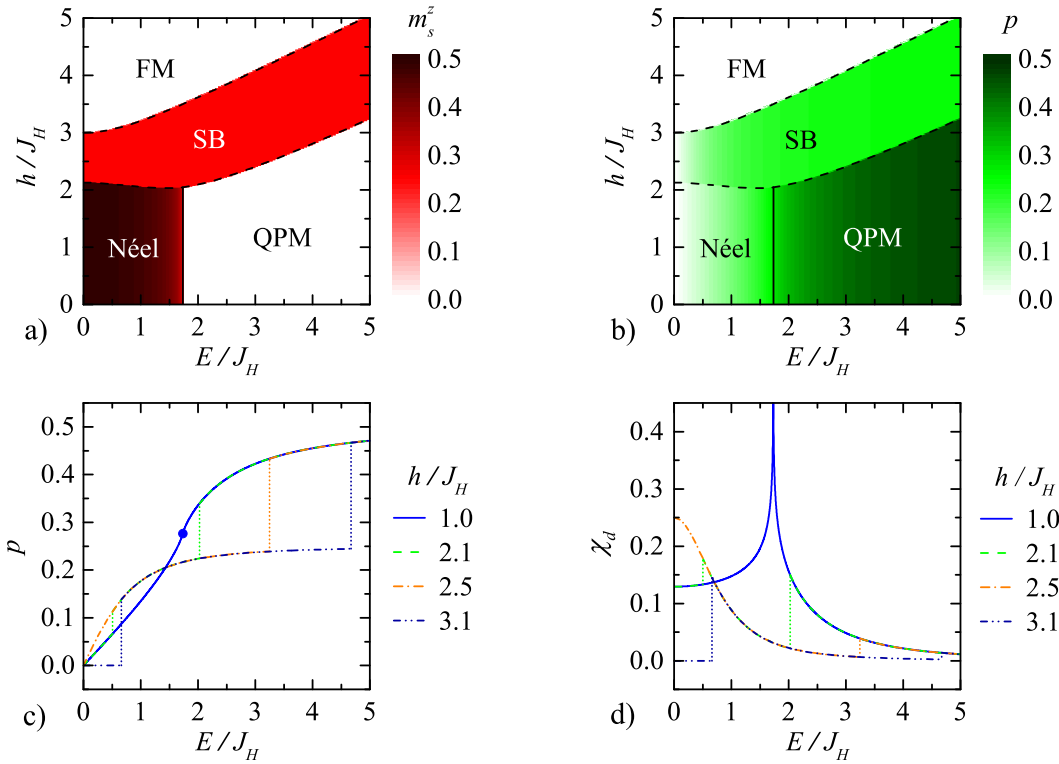


Рис. 5.13. Градієнтне зображення антиферромагнітного параметра порядку намагніченості m_s^z (a) і діелектричної поляризації p (b) як фазової діаграми основного стану в площині $E/J_H - h/J_H$ для співвідношення взаємодій $J_I/J_H = 2$ разом з залежністю від електричного поля діелектричної поляризації p (c) та сприйнятливості χ_d (d) для співвідношення взаємодії $J_I/J_H = 2$ і різних магнітних полів $h/J_H = 1.0, 2.1, 2.5, 3.1$.

дає прямий зв'язок між спіновими операторами обох моделей, що важливо для пошуку інших квантових спінових драбинок, які допускають точні розв'язки.

Найцікавіші результати цього дослідження тісно пов'язані з надзвичайною різноманітністю побудованих фазових діаграм основного стану та квантових фазових переходів між різними фазами. За відсутності зовнішнього магнітного поля фазова діаграма основного стану складається з чотирьох різних упорядкованих фаз і однієї квантової парамагнітної фази. Невпорядкована фаза характеризується короткосяжними спіновими кореляціями, що вказує на домінуючий характер синглет-димерного стану на щаблях у цій фазі. З іншого боку, параметри порядку були точно розраховані для всіх чотирьох упорядкованих фаз, дві з яких мають класичний і дві інші квантовий характер, про що свідчить квантове зменшення параметру порядку в останніх двох фазах. Також було продемонстровано,

що помірно магнітне поле може викликати появу своєрідної SB-фази з чергуванням синглетних і триплетних зв'язків на щаблях двоногій драбинки. Цей останній висновок узгоджується з наявністю плато дробової намагніченості на половині намагніченості насичення. Ці результати також узагальнено на випадок анізотропної XYZ моделі Гайзенберга-Ізинґа на двоногій драбинці, яка досліджена у роботі [19].

У випадку спіні-1/2 тетраедричного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберга точний розв'язок знайдено завдяки локальному збереженню повного спіну на зв'язках Гайзенберга та застосуванню методу матриці переносу. Зокрема, ми розглянули основний стан, процес намагнічення, магнетокалоричний ефект і загальну термодинаміку цієї точно розв'язної моделі. Ця модель демонструє посилений магнетокалоричний ефект. Крім того, слід підкреслити, що точні результати для термодинамічних величин спіні-1/2 тетраедричного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберга також можуть бути корисними для кращого розуміння магнітної поведінки відповідного ланцюжка Гайзенберга при скінченних температурах, припускаючи, що взаємодія вздовж щаблів принаймні вдвічі більша за взаємодію між спінами у сусідніх щаблях.

Наостанок, отримано точний результат для основного стану спіні-1/2 драбинки Гайзенберга-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.

РОЗДІЛ 6

ОРТОГОНАЛЬНО-ДИМЕРНІ МОДЕЛІ НА ОДНОВИМІРНИХ ТА ДВОВИМІРНИХ ҐРАТКАХ

У цьому розділі досліджено низьковимірні моделі з сильними димерними взаємодіями. З одного боку отримано точні результати для одновимірних і двовимірних моделей Ізинґа-Гайзенберґа на ґратках з геометрією димерів, які розташовані ортогонально щодо своїх сусідів. Важливим є те, що у квантовому спіні- $1/2$ ортогонально-димерному ланцюжку із димерною взаємодією Гайзенберґа та міждимерною взаємодією Ізинґа зберігається z -компонента повного спіну на вертикальних зв'язках Гайзенберґа, і ця властивість використовується для точного обчислення статистичної суми за допомогою методу матриці переносу. Завдяки цьому знайдено фазову діаграму основного стану даної моделі в магнітному полі, а також макроскопічне виродження вздовж індукованих полем переходів, що супроводжуються стрибками намагніченості. Подібним є випадок моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда (двовимірний випадок ортогонально-димерної моделі), де збережуваною величиною є z -компонента повного спіну як на вертикальних, так і на горизонтальних зв'язках Гайзенберґа. Як наслідок, унітарне перетворення дозволяє встановити відображення цієї моделі на ефективну класичну спінову модель. Ми знаходимо основний стан моделі, який демонструє криву намагніченості лише з двома дробовими плато $1/3$ та $1/2$ намагніченості насичення, які відповідають стрічковому та шаховому впорядкуванню синглетів та поляризованих триплетів відповідно.

З іншого боку, отримані точні результати для гібридних моделей Ізинґа-Гайзенберґа з сильними димерними взаємодіями дозволяють отримати високоефе-

ктивну теорію збурень для відповідних їм моделей Гайзенберга, де, відсутня в попередньому випадку, XU частина взаємодії трактується як збурення. Таку теорію збурень застосовано до ортогонально-димерних моделей у одному та двох вимірах та показано, що вона дають дуже добру згоду з доступними результатами числових методів уже в другому порядку. Запропонований пертурбативний підхід використовується для пояснення фізичних властивостей моделі Шастри-Сазерленда і відповідної їй експериментальній реалізації сполуки $\text{Cu}_2(\text{VO}_3)_2$. Крім того, наш підхід було застосовано для дослідження полімерної сполуки $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$, яка описується тримеризованим спіном-1/2 ланцюжком Гайзенберга.

Основні результати цього розділу викладені у роботах [22–29, 49, 51–57, 59].

6.1. Точний розв'язок для ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберга

Задамо квантовий спіном-1/2 ортогонально-димерний ланцюжок Ізинґа-Гайзенберга з Гайзенберговою взаємодією всередині димера та Ізинґовою між спінами на сусідніх димерах в магнітному полі через гамільтоніан (див. рис. 6.1):

$$\begin{aligned}
 H &= \sum_{i=1}^N H_i, & (6.1) \\
 H_{2i+1} &= J_1[(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z)s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z(s_{1,2i+2}^z + s_{2,2i+2}^z)] \\
 &\quad + J(\mathbf{s}_{1,2i+1} \cdot \mathbf{s}_{2,2i+1})_\Delta - h(s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z), \\
 H_{2i} &= J(\mathbf{s}_{1,2i} \cdot \mathbf{s}_{2,2i})_\Delta - h(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z),
 \end{aligned}$$

де $(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i})_\Delta = s_{1,i}^x s_{2,i}^x + s_{1,i}^y s_{2,i}^y + \Delta s_{1,i}^z s_{2,i}^z$, $s_{l,i}^\alpha$ ($\alpha = x, y, z$) позначає проекції спіном-1/2 операторів, J — анізотропна Гайзенберґова взаємодія між спінами у вертикальних і горизонтальних зв'язках, Δ — 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 $\mathbf{s}_{l,N+1} \equiv \mathbf{s}_{l,1}$.

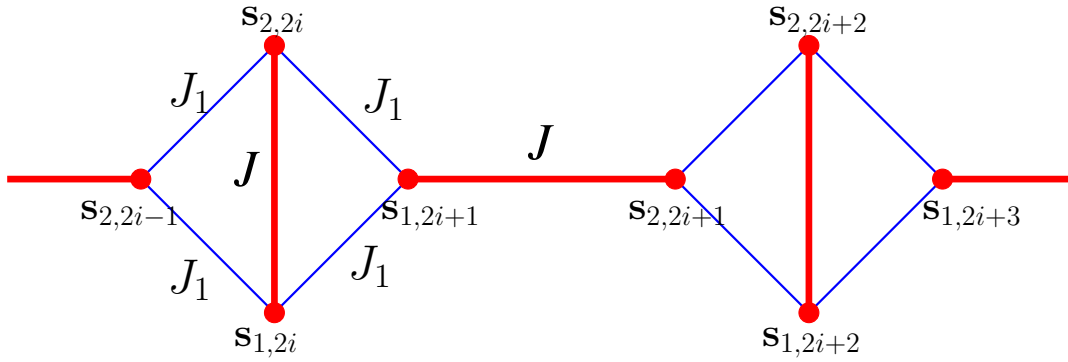


Рис. 6.1. Спін- $\frac{1}{2}$ ортогонально-димерний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга: товстими (тонкими) лініями позначені зв'язки Гайзенберга (Ізинга).

Оскільки z -компонента повного спіну на вертикальному зв'язку Гайзенберга є консервативною величиною, і це єдиний спільний оператор для сусідніх локальних гамільтоніанів H_i , усі H_i комутують один з одним. Звідси випливає, що зручно використати розклад повного гамільтоніана (6.1) на суму комутуючих частин $H = \sum_{i=1}^{N/2} \tilde{H}_{2i+1}$, де

$$\tilde{H}_{2i+1} = H_{2i+1} + (H_{2i} + H_{2i+2})/2. \quad (6.2)$$

Розгляньмо тепер оператор повного спінового моменту на вертикальних зв'язках Гайзенберга $\mathbf{S}_{2i} = \mathbf{s}_{1,2i} + \mathbf{s}_{2,2i}$. Цілком очевидно, що \mathbf{S}_{2i} представляє збережану величину з чітко визначеними квантовими числами $S = 0, 1$ і $|\mathbf{S}_{2i}|^2 = S(S+1)$, $S_{2i}^z = -S, -S+1, \dots, S$ [335]. Відповідні власні стани цього оператора спінового моменту можна позначити як $|S_{2i}, S_{2i}^z\rangle$.

Використавши метод матриці переносу [321], статистичну суму моделі можна записати у такій формі:

$$Z = \text{Tr}_{\{S_{2i}, S_{2i}^z\}} \prod_{i=1}^{N/2} T(S_{2i}, S_{2i}^z; S_{2i+2}, S_{2i+2}^z), \quad (6.3)$$

де матриця переносу $T(S_{2i}, S_{2i}^z; S_{2i+2}, S_{2i+2}^z) = \text{Tr}_{\{s_{1,2i+1}, s_{2,2i+1}\}} \exp(-\beta \tilde{H}_{2i+1})$ містить слід за двома спінами $(2i+1)$ -го горизонтального Гайзенбергового зв'язку. Тут, $\beta = 1/T$ позначає обернену температуру (стала Больцмана приведена до одиниці $k_B = 1$). Пряме обчислення дає матрицю переносу у формі (де рядки і стовпці

відповідають такому набору станів $|0, 0\rangle, |1, 1\rangle, |1, 0\rangle, |1, -1\rangle$:

$$T = \begin{pmatrix} a_4 b_2^2 & a_3^- b_1^- b_2 & a_4 b_2^2 c & a_3^+ b_1^+ b_2 \\ a_3^- b_1^- b_2 & a_1^- (b_1^-)^2 & a_3^- b_1^- b_2 c & a_2 b_1^- b_1^+ \\ a_4 b_2^2 c & a_3^- b_1^- b_2 c & a_4 b_2^2 c^2 & a_3^+ b_1^+ b_2 c \\ a_3^+ b_1^+ b_2 & a_1^- b_1^- b_1^+ & a_3^+ b_1^+ b_2 c & a_1^+ (b_1^+)^2 \end{pmatrix}, \quad (6.4)$$

$$\begin{aligned} a_1^\pm &= 2 \left\{ e^{-\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh[\beta(J_1 \pm h)] + e^{\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) \right\}, \\ a_2 &= 2 \left\{ e^{-\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh(\beta h) + e^{\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{J^2 + 4J_1^2}\right) \right\}, \\ a_3^\pm &= 2 \left\{ e^{-\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh\left[\beta \left(\frac{J_1}{2} \pm h\right)\right] \right. \\ &\quad \left. + e^{\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta}{2} \sqrt{J^2 + J_1^2}\right) \right\}, \\ a_4 &= 2 \left\{ e^{-\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh(\beta h) + e^{\frac{\beta \Delta J}{4}} \cosh\left(\frac{\beta J}{2}\right) \right\}, \\ b_1^\pm &= e^{-\frac{\beta}{2} \left(\frac{\Delta J}{4} \pm h\right)}, \quad b_2 = e^{\frac{\beta J(2+\Delta)}{8}}, \quad c = e^{-\frac{\beta J}{2}}. \end{aligned}$$

У випадку ненульового зовнішнього поля $h \neq 0$ одне власне значення матриці переносу дорівнює нулю, а інші три власні значення задаються коренями кубічного рівняння $\lambda^3 + A\lambda^2 + B\lambda + C = 0$, де

$$\begin{aligned} A &= -a_1^- (b_1^-)^2 - a_1^+ (b_1^+)^2 - a_4 b_2^2 (1 + c^2), \\ B &= \left[(a_1^- (b_1^-)^2 + a_1^+ (b_1^+)^2) a_4 - (a_3^-)^2 (b_1^-)^2 - (a_3^+)^2 (b_1^+)^2 \right] b_2^2 (1 + c^2) \\ &\quad + (a_1^- a_1^+ - a_2^2) (b_1^-)^2 (b_1^+)^2, \\ C &= \left[- (a_1^- a_1^+ - a_2^2) a_4 + a_1^- (a_3^+)^2 + a_1^+ (a_3^-)^2 - 2a_2 a_3^- a_3^+ \right] (b_1^-)^2 (b_1^+)^2 b_2^2 (1 + c^2), \end{aligned}$$

які можна обчислити за допомогою тригонометричних розв'язків кубічного рівняння. У термодинамічній границі вільна енергія на вузол отримується в межах методу матриці переносу [321]:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{1}{2N\beta} \log Z = -\frac{1}{4\beta} \log \lambda_{\max}, \quad (6.5)$$

де λ_{\max} — найбільше власне значення цієї матриці (6.4).

6.1.1. Основний стан

Почнемо з вивчення властивостей основного стану спин-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга. Для цього знайдемо власний стан з найнижчою енергією локального гамільтоніана (6.2), оскільки для одновимірної системи завжди можливо поширити його на весь ланцюжок, а далі довести за допомогою варіаційного принципу, що він утворює глобальний основний стан (див., наприклад, [330]). Використовуючи цю процедуру, ми знайшли такі шість основних станів:

- невироджена *синглет-димерна* (SD) фаза

$$|\text{SD}\rangle = \prod_{i=1}^N |\mathcal{S}_i\rangle, \quad (6.6)$$

$$|\mathcal{S}_i\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle - |\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle) \quad (6.7)$$

з енергією $E_0 = -NJ(2 + \Delta)/4$,

- двократно-вироджена *модульована антиферомагнітна* (MAF) фаза

$$|\text{MAF}\rangle = \prod_{i=1}^{N/4} \left\{ |\uparrow_{1,2i}\uparrow_{2,2i}\rangle |\phi_{2i+1}^{(+)}\rangle |\downarrow_{1,2i+2}\downarrow_{2,2i+2}\rangle |\phi_{2i+3}^{(-)}\rangle, \right. \\ \left. |\downarrow_{1,2i}\downarrow_{2,2i}\rangle |\phi_{2i+1}^{(-)}\rangle |\uparrow_{1,2i+2}\uparrow_{2,2i+2}\rangle |\phi_{2i+3}^{(+)}\rangle, \right. \quad (6.8)$$

$$|\phi_i^{(+)}\rangle = -\sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle + \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle,$$

$$|\phi_i^{(-)}\rangle = \cos\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle + \sin\left(\frac{\alpha}{2}\right) |\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle,$$

$$\cos\alpha = \frac{2J_1}{\sqrt{J^2 + 4J_1^2}} \quad (6.9)$$

з енергією $E_0 = -N\sqrt{J^2 + 4J_1^2}/4$ і квантовою редуцією антиферомагнітної намагніченості спінів на горизонтальних Гайзенбергових зв'язках: $\langle s_{1,2i+1}^z \rangle = \langle s_{2,2i+3}^z \rangle = -\langle s_{2,2i+1}^z \rangle = -\langle s_{1,2i+3}^z \rangle = -\cos\alpha$,

- двократно-вироджена *антиферомагнітна* (AF) фаза

$$|\text{AF}\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} \left\{ |\uparrow_{1,2i}\uparrow_{2,2i}\rangle |\downarrow_{1,2i+1}\downarrow_{2,2i+1}\rangle, \right. \\ \left. |\downarrow_{1,2i}\downarrow_{2,2i}\rangle |\uparrow_{1,2i+1}\uparrow_{2,2i+1}\rangle \right\} \quad (6.10)$$

з енергією $E_0 = N(\Delta J/2 - J_1)/2$,

- двократно-вироджена *модульована феримагнітна* (MFI) фаза

$$|\text{MFI}\rangle = \prod_{i=1}^{N/4} \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow_{1,2i}\uparrow_{2,2i}\rangle |\varphi_{2i+1}^{(+)}\rangle |\mathcal{S}_{2i+2}\rangle |\varphi_{2i+3}^{(-)}\rangle, \\ |\mathcal{S}_{2i}\rangle |\varphi_{2i+1}^{(-)}\rangle |\uparrow_{1,2i+2}\uparrow_{2,2i+2}\rangle |\varphi_{2i+3}^{(+)}\rangle, \end{array} \right. \quad (6.11)$$

$$|\varphi_i^{(+)}\rangle = -\sin\left(\frac{\alpha'}{2}\right) |\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle + \cos\left(\frac{\alpha'}{2}\right) |\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle,$$

$$|\varphi_i^{(-)}\rangle = \cos\left(\frac{\alpha'}{2}\right) |\uparrow_{1,i}\downarrow_{2,i}\rangle + \sin\left(\frac{\alpha'}{2}\right) |\downarrow_{1,i}\uparrow_{2,i}\rangle,$$

$$\cos \alpha' = \frac{J_1}{\sqrt{J_1^2 + J^2}} \quad (6.12)$$

з енергією $E_0 = -N(\sqrt{J^2 + J_1^2} + J(1 + \Delta)/2 + h)/4$ і квантовою редуцією антиферромагнітної намагніченості спінів на горизонтальних Гайзенбергових зв'язках: $\langle s_{1,2i+1}^z \rangle = \langle s_{2,2i+3}^z \rangle = -\langle s_{2,2i+1}^z \rangle = -\langle s_{1,2i+3}^z \rangle = -\cos \alpha'$,

- двократно-вироджена фаза *періодично-змінних зв'язків* (SB)

$$|\text{SB}\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} \left\{ \begin{array}{l} |\uparrow_{1,2i}\uparrow_{2,2i}\rangle |\mathcal{S}_{2i+1}\rangle, \\ |\mathcal{S}_{2i}\rangle |\uparrow_{1,2i+1}\uparrow_{2,2i+1}\rangle \end{array} \right. \quad (6.13)$$

з енергією $E_0 = -N(J/2 + h)/2$,

- *феромагнітна* (FM) фаза

$$|\text{FM}\rangle = \prod_{i=1}^{N/2} |\uparrow_{1,2i}\uparrow_{2,2i}\rangle |\uparrow_{1,2i+1}\uparrow_{2,2i+1}\rangle \quad (6.14)$$

з енергією $E_0 = N(J_1/2 + \Delta J/4 - h)$.

Фазова діаграма основного стану у нульовому полі, показана на рис. 6.2, містить лише три різні основні стани SD, MAF і AF. Очевидно, що SD фаза стає основним станом у частковому випадку антиферромагнітного Гайзенбергового зв'язку і достатньо слабкої міждименрної взаємодії Ізинґа. Коли міждименрна взаємодія Ізинґа J_1 посилюється, починає домінувати MAF фаза з своєрідним квантовим антиферромагнітним порядком спінів на горизонтальних зв'язках Гайзенберґа, що супроводжується змінним характером повністю поляризованих триплетів на вертикальних зв'язках Гайзенберґа (6.8). Нарешті, повністю поляризовані триплетні стани на вертикальному та горизонтальному димерах Гайзенберґа

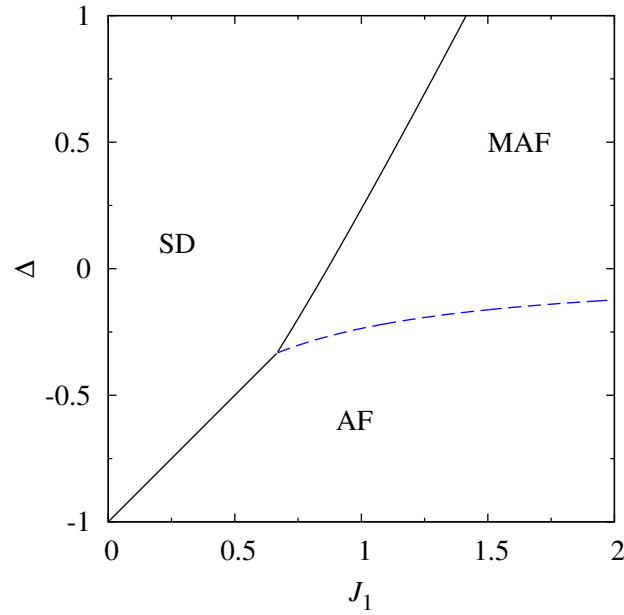


Рис. 6.2. Фазова діаграма основного стану спин-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа (6.1) у нульовому магнітному полі для $J = 1$. Пунктирна лінія вказує на межу фаз із макроскопічним виродженням $2^{N/2}$.

утворюють основний стан для окремого випадку феромагнітного димерного zz зв'язку ($\Delta < 0$), тоді як найближчі вертикальні та горизонтальні зв'язки Гайзенберґа поляризовані в протилежному напрямку. Межу між відповідними фазами можна легко обчислити, порівнюючи енергії основного стану E_0 окремих фаз:

- SD-AF: $\Delta = 2J_1/J - 1$,
- SD-MAF: $\Delta = -2 + \sqrt{1 + 4(J_1/J)^2}$,
- MAF-AF: $\Delta = 2J_1/J - \sqrt{1 + 4(J_1/J)^2}$.

Примітно, що всі криві зустрічаються в одній потрібній точці з координатами $J_1/J = 2/3$, $\Delta = -1/3$. Як буде показано нижче, на межі основний стан між MAF і AF макроскопічно вироджений $\mathcal{W} = 2^{N/2}$.

На рис. 6.3 показано вплив ненульового магнітного поля на загальну фазову діаграму основного стану для кількох значень обмінної анізотропії Δ . Розгляньмо спочатку окремий випадок антиферомагнітної димерної взаємодії Гайзенберґа з $\Delta = 1$. За цієї умови основний стан за відсутності поля може бути фазою SD або MAF залежно від взаємної конкуренції між димерною взаємодією

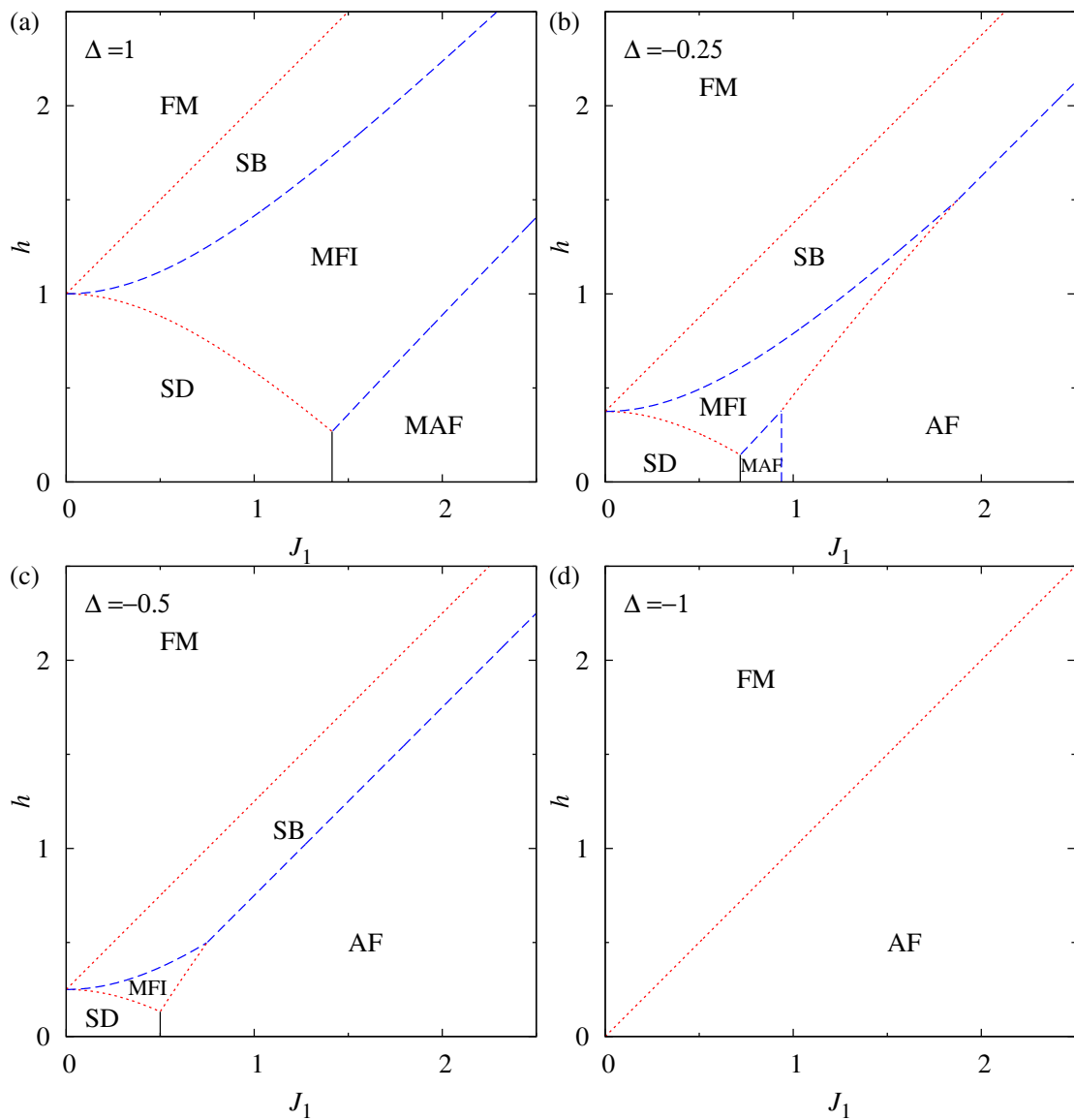


Рис. 6.3. Фазова діаграма основного стану спин-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа для $J = 1$, $\Delta = 1, -0.25, -0.5, -1$. Штрихованими лініями позначено основний стан із макроскопічним виродженням мономерного покриття на ланцюжку, пунктирними лініями позначено макроскопічне виродження димерного покриття на ланцюжку (див. основний текст).

Гайзенберґа та міждимерною взаємодією Ізинґа J і J_1 . Проте магнітне поле середньої сили руйнує як SD, так і MAF стани за рахунок енергетичної стабілізації фази MFI, яка характеризується чергуванням немагнітних синглетів і повністю поляризованих триплетів на вертикальних зв'язках Гайзенберґа. Отже, цей останній основний стан проявляється в процесі намагнічення як проміжне $1/4$ плато, оскільки тут відсутній внесок у загальну намагніченість спінів на горизонтальних

зв'язках Гайзенберга, які демонструють квантовий антиферромагнітний порядок. Подальше збільшення зовнішнього магнітного поля призводить до появи фази SB, в якій регулярно чергуються немагнітні синглети і повністю поляризовані триплети на горизонтальних і вертикальних зв'язках Гайзенберга. В результаті фаза SB спричиняє наявність додаткового плато $1/2$ намагніченості насичення. Нарешті, достатньо сильне магнітне поле природним чином перевертає всі спіни в напрямку зовнішнього поля, що призводить до повністю поляризованої фази FM. У підсумку, крива намагніченості при нульовій температурі відображає два різних проміжних плато при $1/4$ і $1/2$ намагніченості насичення, які виявляють дві фази MFI і SB квантового характеру. Слід зазначити, що ця картина якісно не змінюється для загальнішого випадку антиферромагнітних димерних взаємодій Гайзенберга з $\Delta > 0$.

З іншого боку, можливі кілька топологій фазової діаграми основного стану для окремого випадку $\Delta < 0$, що відповідає ферромагнітній взаємодії Гайзенберга у димері. Якщо $-\frac{1}{3} < \Delta < 0$, нова фаза AF може бути виявлена в області низького поля фазової діаграми основного стану для достатньо високих значень міждиммерної взаємодії Ізинга J_1 . Як наслідок, для достатньо сильних міждиммерних взаємодій модель демонструє прямий індукований полем перехід від фази AF до фази SB з $1/2$ плато, минаючи фазу MFI з $1/4$ плато. Якщо міждиммерна взаємодія Ізинга J_1 достатньо слабка, вплив зовнішнього магнітного поля є подібним до розглянутого раніше випадку. Зростаюче магнітне поле змінює в першому перехідному полі основний стан SD, MAF або AF на MFI фазу з $1/4$ плато, потім у другому перехідному полі фазу MFI на SB фазу з $1/2$ плато і, нарешті, фазу SB при полі насичення до повністю поляризованої фази FM. Ось чому на кривих намагніченості при нульовій температурі все ще присутні дробові плато $1/4$ та $1/2$. Далі вертикальна смуга, що відповідає фазі MAF, повністю зникає з фазової діаграми основного стану для $-1 < \Delta < -\frac{1}{3}$. Нарешті, фазова діаграма основного стану стає досить простою для $\Delta \leq -1$, коли ферромагнітна димерна взаємодія Гайзенберга типу легкої осі підтримує лише поляризовані триpletні стани. Основний стан за відсутності магнітного поля створюється фазою AF, і цей

порядок руйнується в полі насичення до фази FM. З наведених вище аргументів цілком зрозуміло, що обидва проміжні дробові плато $1/4$ та $1/2$ намагніченості насичення зникають з кривої намагніченості при нульовій температурі.

Для повноти картини наведемо отримані вирази для перехідних полів h на межах між окремими фазами і їх макроскопічними виродженнями \mathcal{W} у термодинамічній границі $N \rightarrow \infty$:

- SD-MFI: $h = -\sqrt{J^2 + J_1^2} + \frac{J(3+\Delta)}{2}$, якщо $\Delta > -1$, $\mathcal{W} = (\frac{1+\sqrt{5}}{2})^{N/2}$;
- MAF-MFI: $h = \sqrt{J^2 + 4J_1^2} - \sqrt{J^2 + J_1^2} - \frac{J(1+\Delta)}{2}$, якщо $\Delta > -\frac{1}{3}$, $\mathcal{W} = 2^{N/4}$;
- MFI-SB: $h = \sqrt{J^2 + J_1^2} - \frac{J(1-\Delta)}{2}$, $\mathcal{W} = 2^{N/2}$;
- SB-FM: $h = \frac{J(1+\Delta)}{2} + J_1$, $\mathcal{W} = (\frac{1+\sqrt{5}}{2})^N$;
- AF-MFI: $h = -\sqrt{J^2 + J_1^2} + 2J_1 - \frac{J(1+3\Delta)}{2}$, якщо $-1 < \Delta < 0$, $\mathcal{W} = (\frac{1+\sqrt{5}}{2})^{N/2}$;
- AF-SB: $h = -\frac{J(1+\Delta)}{2} + J_1$, якщо $-1 < \Delta < 0$, $\mathcal{W} = 2^{N/2}$;
- AF-FM: $h = J_1$, якщо $\Delta < -1$, $\mathcal{W} = (\frac{1+\sqrt{5}}{2})^N$.

Варто зауважити, що основний стан на деяких границях фаз є сильно виродженим. Щоб отримати виродження, ми можемо застосувати спосіб підрахунку димерних покриттів у ланцюжку як зроблено в роботі [342]. Розглянемо, наприклад, межу фаз між фазами SB і FM. FM-фазу можна представити як одновимірний ґратковий газ, де всі вузли порожні $[\cdots \circ \circ \circ \circ \dots]$, тоді як фаза SB відповідає конфігурації, де зайнято кожен другий вузол $[\cdots \bullet \circ \bullet \circ \dots]$. Тут намагнічений стан димера Гайзенберґа покладаємо як порожній стан, а його немагнітний синглетний стан — заповнений стан. У результаті можна побудувати основний стан на відповідній межі розділу між цими двома фазами з усіх конфігурацій частинок з наступним обмеженням: частинки не можуть займати сусідні вузли, тобто. між частинками існує нескінченно сильне відштовхування найближчих сусідів. Таку систему можна переформулювати як проблему димера, а розраховане виродження в термодинамічній границі визначається $[(1 + \sqrt{5})/2]^N$ [342]. Слід зазначити, що таке ж значення виродження отримується на межі між фазами FM і AF, якщо стан зв'язку $S_i^z = -1$ (\downarrow) розглядати як зайнятий вузол. Подібне представлен-

ня може бути побудовано також на межах SD-MFI і AF-MFI. Єдина відмінність полягає в тому, що в картині ґраткового газу беруть участь тільки вертикальні зв'язки Гайзенберґа. Отже, таке виродження дорівнює $[(1 + \sqrt{5})/2]^{N/2}$.

Усі інші межі мають виродження мономерів на ланцюжку розміром $N/2$ або $N/4$ або вільних спінів Ізинґа. Наприклад, розгляньмо всі можливі конфігурації на межі між станами MAF і MFI. Фаза MAF узгоджується з антиферомагнітним порядком вертикальних зв'язків Гайзенберґа і може бути схематично представлена як $[\dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots]$. Навпаки, фаза MFI демонструє на вертикальних димерах Гайзенберґа регулярне чергування повністю поляризованих триплетних і немагнітних синглетних зв'язків $[\dots \uparrow 0 \uparrow 0 \dots]$. Тут $\uparrow(\downarrow)$ позначає $S_{2i}^z = \pm 1$ стан, а 0 відноситься до синглетного стану. Обидві фази є подвійно виродженими. У цьому конкретному випадку стан зв'язку на непарних вертикальних зв'язках Гайзенберґа збігається для обох фаз, тоді як два різні стани (або поляризовані, або синглетні) доступні для будь-якого парного вертикального зв'язку Гайзенберґа. Тоді два ступені свободи будь-якого парного вертикального зв'язку Гайзенберґа можна ідентифікувати як фіктивний Ізинґовий спін $1/2$ і, отже, основний стан на межі між фазами MAF і MFI має макроскопічне виродження $2^{N/4}$. Окремий випадок межі AF-SB має те саме зображення, що й межа MAF-MFI. З тією лише різницею, що мова йде не лише про вертикальні, а про всі Гайзенберґові зв'язки. Таким чином, макроскопічне виродження на межі фаз AF-SB пропорційне $2^{N/2}$.

Фази MAF і AF також мають класичні впорядкування (антиферомагнітні та феромагнітні) для вертикальних зв'язків, тобто $[\dots \uparrow\downarrow\uparrow\downarrow \dots]$ і $[\dots \uparrow\uparrow\uparrow \dots]$, $[\dots \downarrow\downarrow\downarrow \dots]$ відповідно. На межі основного стану енергія будь-якого випадкового впорядкування конфігурацій вертикальних зв'язків буде однаковою, що означає, що виродження основного стану дорівнює $2^{N/2}$ для цього конкретного випадку. Подібним є випадок розділу фаз між фазами MFI і SB. Єдина відмінність від попереднього випадку полягає в тому, що \downarrow на вертикальних зв'язках потрібно змінити на синглетний стан 0. Решта аналізу аналогічна і дає виродження $2^{N/2}$.

Порівнюючи фазову діаграму основного стану спін- $1/2$ ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа з аналогічним результатом для

ортогонально-димерного ланцюжка Гайзенберга, отриманим за допомогою методу DMRG (див. рис. 9 статті [124]), бачимо, що обидві фазові діаграми містять області з плато намагніченості нуль, $1/4$ і $1/2$. Різниця між фазовими діаграмами стає принципово помітною для достатньо сильної міждимерної взаємодії J_1 , коли димер-плакетна фаза з'являється в моделі Гайзенберга замість фази MAF, характерної для моделі Ізинга-Гайзенберга. Ця розбіжність викликана нескінченно сильною анізотропією взаємодії Ізинга між димерами. Крім того, спін- $1/2$ ортогонально-димерний ланцюжок Гайзенберга демонструє нескінченну послідовність сходинок намагніченості між плато намагніченості $1/4$ та $1/2$ [120], а також неперервну зміну намагніченості від $1/2$ плато до намагніченості насичення. З іншого боку, спін- $1/2$ ортогонально-димерний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга демонструє макроскопічне виродження в полі насичення, яке супроводжується відповідним стрибком намагніченості.

6.1.2. Термодинаміка і магнетокалоричний ефект

Макроскопічне виродження на межі двох фаз основного стану може проявлятися в низькотемпературній поведінці основних термодинамічних величин, як ентропія, теплоємність або намагніченість. Слід зауважити, що ентропія може приймати скінченні значення при нульовій температурі щоразу, коли основний стан є макроскопічно виродженим через співіснування фаз. Ентропію на спін можна легко отримати за допомогою термодинамічного співвідношення $s = -(\partial f / \partial T)$, а залишкову ентропію на межах фаз, пов'язаних з макроскопічним виродженням основного стану, за рівнянням Больцмана $s_0 = \frac{1}{2N} \ln \mathcal{W}$ [343]. Таким чином, залишкова ентропія на межі між різними фазами може бути прямо обчислена за результатами, представленими в підрозділі 6.1.1. Враховуючи все це, залишкова ентропія приймає значення $\frac{1}{2} \ln((1 + \sqrt{5})/2) \approx 0.2406$ на межах SB-FM і AF-FM, $\frac{1}{4} \ln((1 + \sqrt{5})/2) \approx 0.1203$ на межах SD-MFI і AF-MFI, $\frac{1}{4} \ln 2 \approx 0.1733$ на межах MFI-SB і AF-SB, $\frac{1}{8} \ln 2 \approx 0.0866$ на межі MAF-MFI. Як видно з рис. 6.4, польова залежність ентропії справді показує помітні піки в перехідних полях, ви-

сота яких відповідає розрахованим вище значенням залишкової ентропії (окремий випадок, показаний на рис. 6.4, демонструє три послідовні індуковані полем переходи SD-MFI, MFI-SB і SB-FM). З рис. 6.4 також добре видно, що навіть невелика

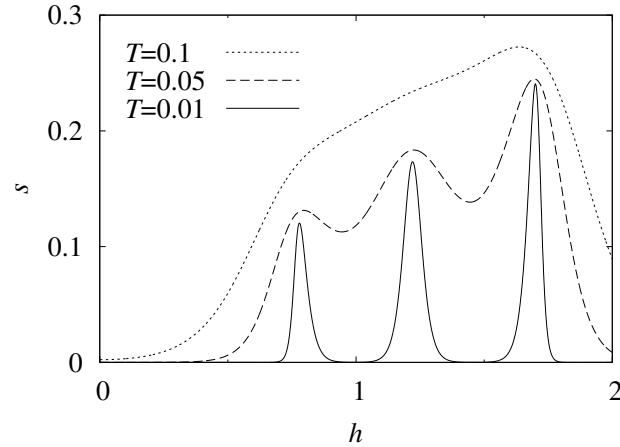


Рис. 6.4. Ентропія на спіні в залежності від магнітного поля для спіні-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа з $J = 1$, $\Delta = 1$, $J_1 = 0.7$ при різних температурах $T = 0.01, 0.05, 0.1$ (знизу вгору).

температура згладжує польову залежність ентропії і таким чином руйнує її чіткий профіль. Крім того, добре відомо, що фрустровані квантові спінові моделі можуть демонструвати посилений магнетокалоричний ефект поблизу індукованої полем квантової критичної точки [337, 344–346]. Тому ми також дослідили адіабатичне розмагнічування моделі, яке можна легко зрозуміти з рис. 6.5. Криві постійної ентропії визначають зміну температури з магнітним полем під час адіабатного процесу. Оскільки наша модель ланцюжка може мати до трьох критичних полів, що супроводжуються макроскопічним виродженням основного стану — температура швидко змінюється поблизу критичного поля щоразу, коли ентропія вибирається досить близько до відповідного значення залишкової ентропії. Така поведінка, очевидно, сприяє високому адіабатичному магнетокалоричному градієнту $(\partial T/\partial h)_s$.

Слід зауважити, що ми також запропонували ряд ефективних моделей для термодинамічного опису ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа у магнітних полях, де він демонструє стрибки намагніченості між дробовими плато 1/4 і 1/2 намагніченості насичення в основному стані. Зокрема, сформульовано

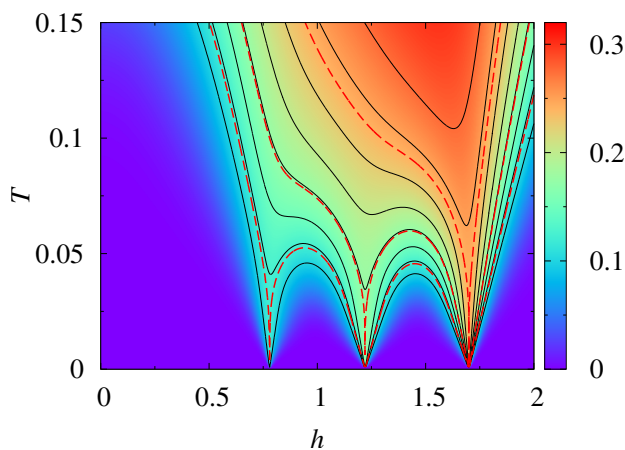


Рис. 6.5. Градієнтне зображення ентропії як функції магнітного поля та температури для ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа з $J = 1$, $\Delta = 1$, $J_1 = 0.7$. Криві зі сталою ентропією відповідають $s = 0.1, 0.125, \dots, 0.3$ (суцільні лінії) і до $s = 0.120, 0.1732, 0.2406$ (штриховані лінії).

підхід ґраткового газу в околі критичних полів, щоб пояснити низькотемпературну поведінку теплоємності [23].

6.1.3. Застосування до опису магнітних полімерних сполук

$[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$

Як зазначено у розділі 1, полімерна сполука $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$ є близькою реалізацією спінів-1/2 ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа (див. рис. 1.3 (b) для ілюстрації), який можна задати таким гамільтоніаном:

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & J_{\text{H}} \sum_{i=1}^N \hat{\mathbf{S}}_{1,i} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,i} + J'_{\text{I}} \sum_{i=1}^N \hat{\sigma}_{1,i}^z \hat{\sigma}_{2,i}^z + J_{\text{I}} \sum_{i=1}^N [\hat{S}_{1,i}^z (\hat{\sigma}_{1,i}^z + \hat{\sigma}_{2,i}^z) + \hat{S}_{2,i}^z (\hat{\sigma}_{1,i+1}^z + \hat{\sigma}_{2,i+1}^z)] \\ & - g_{\text{H}} \mu_{\text{B}} B \sum_{i=1}^N (\hat{S}_{1,i}^z + \hat{S}_{2,i}^z) - g_{\text{I}} \mu_{\text{B}} B \sum_{i=1}^N (\hat{\sigma}_{1,i}^z + \hat{\sigma}_{2,i}^z), \end{aligned} \quad (6.15)$$

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 спінів-1/2 оператори, що відносяться до магнітних іонів Cu^{2+} як Гайзенберґових спінів, і $\hat{\sigma}_{1(2),i}^z$ стосується z -компоненти спінів-1/2 операторів, що відповідають магнітним іонам Dy^{3+} як класичних Ізинґових спінів. Константи взаємодій J_{H} і J'_{I} визначають силу Гайзенберґових та

Ізинґових димерних взаємодій в межах горизонтальних Cu^{2+} - Cu^{2+} і вертикальних Dy^{3+} - Dy^{3+} димерів, відповідно, в той час як константа взаємодії J_{I} визначає силу Ізинґової міждимерної взаємодії між найближчими магнітними іонами Cu^{2+} і 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 Гайзенберґових та Ізинґових спінів за наявності зовнішнього магнітного поля B , які відрізняються через різні гіромагнітні співвідношення g_{H} і g_{I} для іонів Cu^{2+} і Dy^{3+} , відповідно.

Варто зауважити, що статистична сума, вільна енергія Гібса та намагніченість моделі, визначені через гамільтоніан (6.15), були точно розраховані за періодичних граничних умов $\hat{\sigma}_{1(2),N+1}^z \equiv \hat{\sigma}_{1(2),1}^z$ у нашій статті [27]. Використана процедура обчислення використовує перевагу розбиття загального гамільтоніана (6.15) на комутуючі шестиспінові кластерні гамільтоніани, що включають один горизонтальний Cu^{2+} - Cu^{2+} димер і два сусідні вертикальні Dy^{3+} - Dy^{3+} димери, які дозволяють прямий розклад статистичної суми на множники відповідних факторів Больцмана. Після просумування спінових ступенів вільності горизонтального димера Cu^{2+} - Cu^{2+} (димера Гайзенберґа) статистична сума фактично виражається через матрицю переносу від спінових станів двох суміжних вертикальних димерів Dy^{3+} - Dy^{3+} (димерів Ізинґа), і вся магнетотермодинаміка може бути вивчена за допомогою методу матриці переносу [27]. Особливістю розгляду є те, що g -фактори для магнітних іонів Cu^{2+} та Dy^{3+} відрізняються, їхні очікувані (типові) значення є такими: $g_{\text{H}} \approx 2$ для Cu^{2+} магнітних іонів і $g_{\text{I}} \approx 20$ для магнітних іонів Dy^{3+} . Тому адаптуємо точний розв'язок для ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа [22, 27], щоб дослідити вплив різних «локальних магнітних полів» $h_{\text{H}} \neq h_{\text{I}}$, які виникають внаслідок різниці гіромагнітних факторів магнітних іонів Cu^{2+} і Dy^{3+} $g_{\text{H}} \neq g_{\text{I}}$.

Далі детально розглядається основний стан і процес намагнічування ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа, покладаючи гіромагнітні фактори $g_{\text{H}} = 2$ і $g_{\text{I}} = 20$, які близькі до типових значення g -факторів Ланде для магнітних іонів Cu^{2+} та Dy^{3+} відповідно. Щоб зменшити кількість вільних параметрів, величина константи зв'язку $J_{\text{I}} > 0$, що відповідає антиферромагнітній

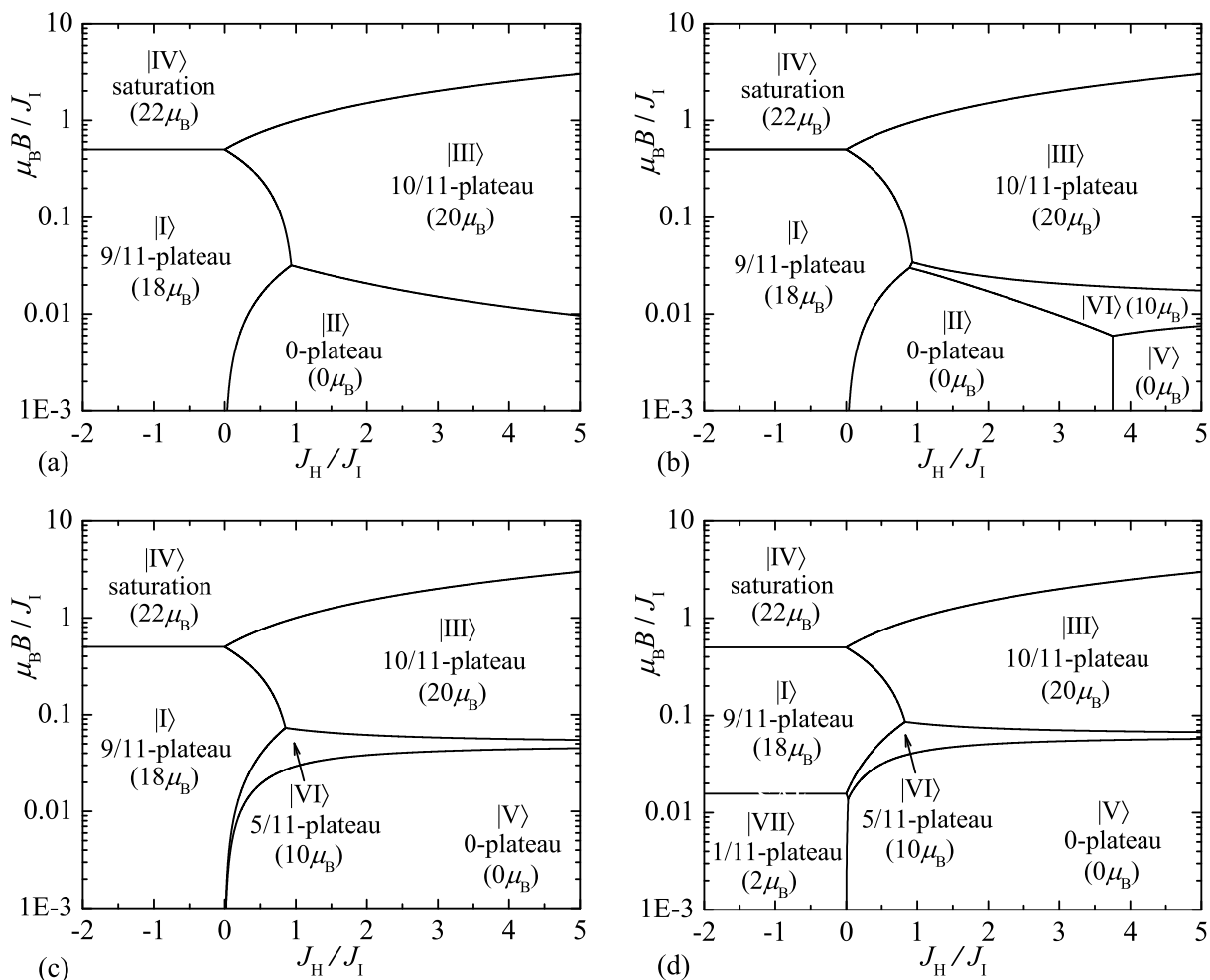


Рис. 6.6. Напівлогарифмічний графік фазової діаграми основного стану ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа з гіромагнітними факторами $g_H = 2$ і $g_I = 20$ у площині $J_H/J_I - \mu_B B/J_I$ для чотирьох репрезентативних значень співвідношення взаємодій: (а) $J'_I/J_I = -0.5$; (б) $J'_I/J_I = 0.5$; (с) $J'_I/J_I = 2.0$; (д) $J'_I/J_I = 2.5$. Числа в круглих дужках визначають загальну намагніченість в одиницях магнетона Бора μ_B , а частки представляють її відносно значення щодо намагніченості насичення.

міждимерній взаємодії Ізинґа $Dy^{3+}-Cu^{2+}$, служить одиницею енергії при визначенні відносної сили димерної взаємодії Гайзенберґа J_H/J_I всередині горизонтальних димерів, димерної взаємодії Ізинґа J'_I/J_I у вертикальних димерах і магнітному полі $\mu_B B/J_I$.

Наша модель з гіромагнітними факторами $g_H = 2$ і $g_I = 20$ може демонструвати у магнітному полі до семи різних основних станів залежно від співвідношень взаємодій J_H/J_I , J'_I/J_I та магнітного поля $\mu_B B/J_I$. Типові фазові діаграми основ-

ного стану представлені на рис. 6.6 у площині параметрів $J_{\text{H}}/J_{\text{I}} - \mu_{\text{B}}B/J_{\text{I}}$ для чотирьох значень $J'_{\text{I}}/J_{\text{I}} = -0.5, 0.5, 2.0$ і 2.5 . З рис. 6.6 (а) цілком очевидно, що фазова діаграма основного стану для окремого випадку з ферромагнітним димерним зв'язком Ізинґа $J'_{\text{I}}/J_{\text{I}} = -0.5$ включає лише чотири різні основні стани, точніше, класичну ферромагнітну фазу $|I\rangle$ з антипаралельним розташуванням спінів димерів Ізинґа та Гайзенберґа, що характеризується наступним власним вектором і відповідною власною енергією:

$$|I\rangle = \prod_{i=1}^N \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle_i \otimes |\downarrow\downarrow\rangle_i, \quad E_{\text{I}} = \frac{N}{4} (J_{\text{H}} + J'_{\text{I}} - 4J_{\text{I}} - 4h_{\text{I}} + 4h_{\text{H}}), \quad (6.16)$$

модульована квантова антиферромагнітна фаза $|II\rangle$ з антиферромагнітним впорядкуванням димерів Ізинґа та синглетоподібним станом димерів Гайзенберґа

$$\begin{aligned} |II\rangle &= \prod_{i=1}^{N/2} \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_{2i-1} \otimes \left(\sin \varphi_2 |\uparrow\downarrow\rangle_{2i-1} - \cos \varphi_2 |\downarrow\uparrow\rangle_{2i-1} \right) \\ &\quad \otimes \left| \begin{smallmatrix} \downarrow \\ \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle_{2i} \otimes \left(\cos \varphi_2 |\uparrow\downarrow\rangle_{2i} - \sin \varphi_2 |\downarrow\uparrow\rangle_{2i} \right), \\ E_{\text{II}} &= -\frac{N}{4} \left(J_{\text{H}} + 2\sqrt{4J_{\text{I}}^2 + J_{\text{H}}^2} - J'_{\text{I}} \right), \quad \varphi_2 = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{J_{\text{H}}}{2J_{\text{I}}} \right), \end{aligned} \quad (6.17)$$

квантова ферромагнітна фаза $|III\rangle$ з повністю поляризованими димерами Ізинґа та ідеальним синглетним станом димерів Гайзенберґа

$$|III\rangle = \prod_{i=1}^N \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_i \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle_i - |\downarrow\uparrow\rangle_i), \quad E_{\text{III}} = -\frac{N}{4} (3J_{\text{H}} - J'_{\text{I}} + 4h_{\text{I}}), \quad (6.18)$$

і, нарешті, насичена парамагнітна фаза $|IV\rangle$ з повністю поляризованими димерами Ізинґа та Гайзенберґа

$$|IV\rangle = \prod_{i=1}^N \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_i \otimes |\uparrow\uparrow\rangle_i, \quad E_{\text{IV}} = \frac{N}{4} (J_{\text{H}} + J'_{\text{I}} + 4J_{\text{I}} - 4h_{\text{I}} - 4h_{\text{H}}). \quad (6.19)$$

Важливо, що всі власні вектори записуються як тензорний добуток за станами вертикальних димерів Ізинґа (перший вектор стану) і горизонтальних димерів Гайзенберґа (другий вектор стану), відповідно. За достатньо низьких магнітних

полів класична феримагнітна фаза |I⟩ домінує в області параметрів із феромагнітним Гайзенберговим димерним зв'язком $J_H < 0$, тоді як модульована квантова антиферомагнітна фаза |II⟩ і квантова феримагнітна фаза |III⟩ домінують в області параметрів з антиферомагнітним Гайзенберговим димерним зв'язком $J_H > 0$. Звичайно, насичена парамагнітна фаза |IV⟩ представляє фактичний основний стан при достатньо високих магнітних полях, незалежно від того, чи розглядається феромагнітна чи антиферомагнітна димерна взаємодія Гайзенберга.

З іншого боку, фазова діаграма основного стану моделі для $[\text{Du}_2\text{Cu}_2]_n$ із відносно слабким антиферомагнітним димерним зв'язком Ізинґа додатково включає два інші основні стани [див. рис. 6.6 (b) для $J'_1/J_1 = 0.5$], яку можна ідентифікувати як фрустровану квантову антиферомагнітну фазу |V⟩ з подвійним виродженням антиферомагнітним станом димерів Ізинґа та ідеальним синглетним станом димерів Гайзенберга

$$|V\rangle = \prod_{i=1}^N \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle_i \left(\text{or } \left| \begin{smallmatrix} \downarrow \\ \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_i \right) \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle_i - |\downarrow\uparrow\rangle_i), \quad E_V = -\frac{N}{4} (3J_H + J'_1), \quad (6.20)$$

і сильно вироджена модульована квантова феримагнітна фаза |VI⟩ із змінним феро-антиферомагнітним характером димерів Ізинґа та квазі-синглетним станом димерів Гайзенберга

$$\begin{aligned} |VI\rangle &= \prod_{i=1}^{N/2} \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_{2i-1} \otimes \left(\sin \varphi_6 |\uparrow\downarrow\rangle_{2i-1} - \cos \varphi_6 |\downarrow\uparrow\rangle_{2i-1} \right) \otimes \left| \begin{smallmatrix} \uparrow \\ \downarrow \end{smallmatrix} \right\rangle_{2i} \left(\text{or } \left| \begin{smallmatrix} \downarrow \\ \uparrow \end{smallmatrix} \right\rangle_{2i} \right) \\ &\quad \otimes \left(\cos \varphi_6 |\uparrow\downarrow\rangle_{2i} - \sin \varphi_6 |\downarrow\uparrow\rangle_{2i} \right), \\ E_{VI} &= -\frac{N}{4} \left(J_H + 2\sqrt{J_1^2 + J_H^2} + 2h_1 \right), \quad \varphi_6 = \frac{1}{2} \arctan \left(\frac{J_H}{J_1} \right). \end{aligned} \quad (6.21)$$

З рис. 6.6 (b) цілком зрозуміло, що фазова діаграма основного стану не змінилася в просторі параметрів із феромагнітним димерним зв'язком Гайзенберга $J_H < 0$, тоді як виникають два нові основні стани при низьких (аж до помірних) магнітних полях у просторі параметрів із достатньо сильним антиферомагнітним димерним зв'язком Гайзенберга $J_H > 0$. Слід зазначити, що фрустрована квантова антиферомагнітна фаза |V⟩ пригнічує модульовану квантову антиферомагнітну фазу |II⟩

при збільшенні відносної сили антиферромагнітного Ізинґового димерного зв'язку J'_1/J_1 , поки цей стан повністю не зникне з фазової діаграми основного стану, про що свідчить рис. 6.6 (с) для $J'_1/J_1 = 2.0$. Важливим є те, що достатньо сильний антиферромагнітний Ізинґовий димерний зв'язок $J'_1/J_1 > 2$ може додатково викликати появу нового основного стану також у просторі параметрів із ферромагнітним димерним зв'язком Гайзенберґа $J_H < 0$ і достатньо малими магнітними полями, який можна ідентифікувати як фрустровану феримагнітну фазу |VII> з двократним виродженням антиферромагнітного стану димерів Ізинґа та повністю поляризованих димерів Гайзенберґа:

$$|VII\rangle = \prod_{i=1}^N \left| \begin{array}{c} \uparrow \\ \downarrow \end{array} \right\rangle_i \left(\text{or } \left| \begin{array}{c} \downarrow \\ \uparrow \end{array} \right\rangle_i \right) \otimes |\uparrow\uparrow\rangle_i, \quad E_{VII} = \frac{N}{4} (J_H - J'_1 - 4h_H). \quad (6.22)$$

Щілинні основні стани (6.16)–(6.22) повинні проявлятися на кривих намагніченості при нульовій і низькій температурах моделі як проміжні плато при дробових значеннях намагніченості насичення. Враховуючи конкретні значення гіромагнітних факторів $g_H = 2$ і $g_I = 20$, можна виявити, що ортогонально-димерний ланцюжок Ізинґа-Гайзенберґа демонструє значну різноманітність кривих намагнічення з дев'ятьма можливими сценаріями намагнічення, як показано на рис. 6.7.

Згідно з отриманими вище фазовими діаграмами основного стану, можна знайти три різні сценарії поведінки намагніченості: з одним фазовим переходом, керованим полем |I>–|IV> [рис. 6.7(a)], з трьома індукованими полем фазовими переходами |II>–|I>–|III>–|IV> [рис. 6.7(b)], або з двома фазовими переходами, керованими полем |II>–|III>–|IV> [рис. 6.7(c)] на основі припущення, що димерний зв'язок Ізинґа є ферромагнітним $J'_1 < 0$. Окремий випадок зі слабким антиферромагнітним Ізинґовим димерним зв'язком $J'_1/J_1 \gtrsim 0$ відображає інші три типи процесів намагнічення через наявність фаз |V> та/або |VI>: один тип передбачає послідовність чотирьох фазових переходів, керованих полем |II>–|VI>–|I>–|III>–|IV> [рис. 6.7(d)], а інші два типи включають послідовність трьох індукованих полем фазових переходів |II>–|VI>–|III>–|IV> [рис. 6.7(e)] або |V>–|VI>–|III>–|IV> [рис. 6.7(f)] відповідно. Нарешті, конкретний випадок із достатньо сильним анти-

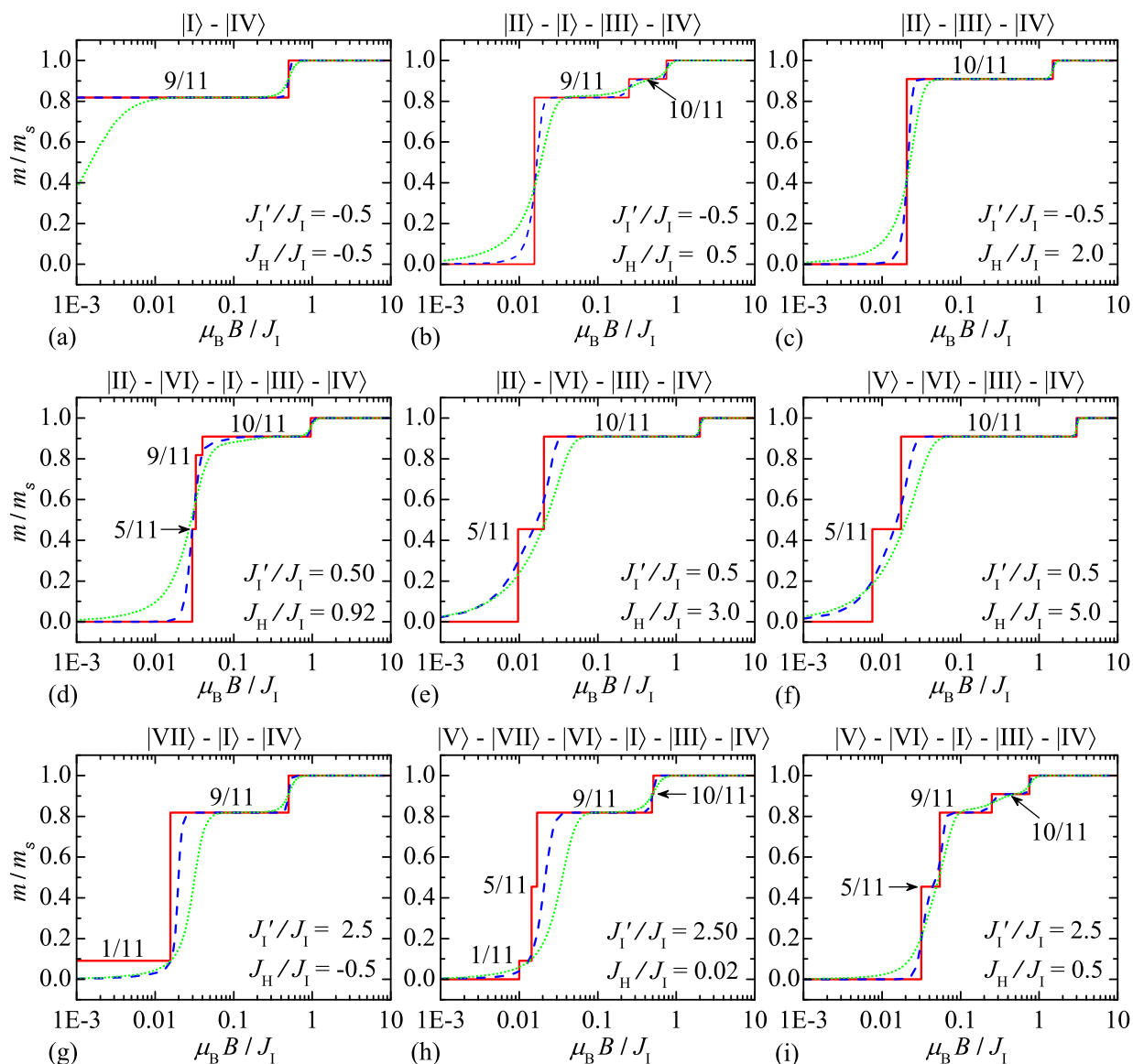


Рис. 6.7. Напівлогарифмічний графік усіх репрезентативних ізотермічних кривих намагніченості моделі (6.15) з гіромагнітними факторами $g_H = 2$ і $g_I = 20$, розрахованими при трьох різних температурах $k_B T / J_I = 0$ (суцільні червоні лінії), 0.05 (сині пунктирні лінії) і 0.15 (зелені пунктирні лінії). Різні панелі демонструють різноманіття процесу намагнічення в основному в залежності від вибору констант зв'язку J_H / J_I і J'_I / J_I , указані у відповідних панелях.

ферромагнітним Ізінговим димерним зв'язком $J'_I / J_I \gg 0$ може демонструвати три інші сценарії намагніченості, які включають послідовність двох зумовлених полем фазових переходів $|VII\rangle - |I\rangle - |IV\rangle$ [рис. 6.7(g)], п'ять індукованих полем фазових переходів $|V\rangle - |VII\rangle - |VI\rangle - |I\rangle - |III\rangle - |IV\rangle$ [рис. 6.7(h)] або чотири індукованих полем фазових переходів $|V\rangle - |VI\rangle - |I\rangle - |III\rangle - |IV\rangle$ [рис. 6.7(i)] відповідно.

Тут доречно згадати проблему температурної стійкості окремих плато на-

магніченості. З рис. 6.7 цілком очевидно, що деякі проміжні плато є досить жорсткими щодо теплових флуктуацій, і їх можна чітко розрізнити на відповідних ізотермічних кривих намагніченості при низьких ($k_B T / J_I = 0.05$) або навіть при помірних ($k_B T / J_I = 0.15$) температурах. Зазвичай це стосується плато нульової намагніченості та проміжних плато 9/11 і 10/11, що виникають при вищих значеннях намагніченості. З іншого боку, проміжні 1/11- і 5/11-плато, що виникають при менших значеннях намагніченості, зазвичай піддаються значному згладжуванню при підвищенні температури, і їх неможливо чітко розрізнити на відповідних ізотермічних кривих намагніченості навіть при відносно низькій температурі ($k_B T / J_I = 0.05$). Цей висновок може бути пов'язаний із суттєвою різницею енергетичної щільності окремих основних станів, приписаних відповідним плато намагніченості. Власне кажучи, щільні основні стани, наприклад класична та квантова феримагнітні фази |I⟩ та |III⟩ мають велику енергію щільності у спектрі збуджень. Навпаки, сильно вироджені основні стани, такі як фрустрована феримагнітна фаза |VII⟩ і модульована квантова феримагнітна фаза |VI⟩, мають лише крихітну енергетичну щільність і отже, вони піддаються значному термічному згладжуванню через їх макроскопічні виродження.

Перейдемо до порівняння теоретичних результатів для моделі (6.15) з доступними експериментальними даними для кривої намагніченості $3d-4f$ гетеробіметалічного координаційного полімеру $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$, виміряного в імпульсних магнітних полях до 10 Т при температурі $T = 0.5$ К [212]. Слід зазначити, що дані про намагніченість, записані в імпульсних магнітних полях, демонструють великий гістерезис в області слабого поля $B \lesssim 0.5$ Т, який для простоти ігноруємо, оскільки він виходить за межі теоретичної моделі. Зі вставки на рис. 4(а) статті [212] фактично випливає, що магнітний гістерезис в основному залежить від швидкості сканування поля, і, отже, його можна віднести до квантового тунелювання намагніченості, яке зазвичай спостерігається в одинарних ланцюжкових магнетиках через перетин рівнів між збудженими станами. Варто зауважити, що всі п'ять параметрів гамільтоніану моделі (6.15), повинні були бути параметрами припасування, щоб отримати найкращу теоретичну згоду з експериментальними

даними для намагніченості (див. рис. 6.8 для порівняння). Відповідно, найкращу теоретичну відповідність було отримано для наступного набору параметрів моделі: $J_I/k_B = 8.02$ К, $J'_I/k_B = 17.35$ К, $J_H/k_B = 1.73$ К, $g_H = 2.28$ і $g_I = 18.54$.

Отримане значення гіромагнітного фактора $g_H = 2.28$ є досить типовим для магнітних іонів Cu^{2+} , тоді як інше значення $g_I = 18.54$ є лише на кілька відсотків (приблизно 7%) менше, ніж теоретично очікуване значення $g_{\text{Dy}} = 20$ для ефективного опису зі спіном Ізинґа магнітних іонів Dy^{3+} із повним кутовим моментом $J = 15/2$ і відповідний g -фактор $g_J = 4/3$ [213, 347]. Крім того, слід зазначити, що значення констант міждимерного та димерного зв'язку Ізинґа J_I та J'_I також мають бути перенормовані за допомогою коефіцієнтів 15 і 225, щоб отримати справжні значення констант зв'язку між Dy^{3+} - Cu^{2+} і Dy^{3+} - Dy^{3+} магнітних іонів при відході від ефективного спінового опису Dy^{3+} магнітних іонів. Фактичні значення трьох розглянутих констант зв'язку є такими: $J_{\text{Dy-Cu}}/k_B = 0.53$ К, $J_{\text{Dy-Dy}}/k_B = 0.08$ К і $J_{\text{Cu-Cu}}/k_B = 1.73$ К, тоді як прогнозовані значення констант зв'язку $J_{\text{Dy-Cu}}$ і $J_{\text{Dy-Dy}}$ потрапляють у прийнятний діапазон для констант зв'язку між $3d-4f$ і $4f-4f$ магнітними іонами відповідно [213, 347]. Крім того попередня константа обмінної взаємодії порівнянна із середнім значенням зв'язку $J_{\text{Dy-Cu}}/k_B = 0.48$ К, яке можна розрахувати з констант зв'язку $J_A/k_B = 0.895$ К і $J_B/k_B = 0.061$ К, призначені раніше для двох різних шляхів обміну між Dy^{3+} - Cu^{2+} магнітних іонів у спрощеній чотириядерній моделі [212]. Варто зауважити, що вказане значення константи зв'язку $J_{\text{Cu-Cu}}/k_B = 1.73$ К є відносно малим щодо найкоротшої відстані між Cu^{2+} - Cu^{2+} магнітних іонів, але це мале значення можна пояснити досить неефективним шляхом обміну, що включає подвійний кисневий місток між магнітними ($3d_{x^2-y^2}$) і немагнітними ($3d_{z^2}$) орбіталями магнітних іонів Cu^{2+} у витягнутому квадратно-пірамідальному середовищі [див. рис. 1.3 (а)].

Прогнозовані значення констант зв'язку ортогонально-димерного ланцюжка узгоджуються з наступними значеннями $J'_I/J_I \approx 2.2$ і $J_H/J_I \approx 0.2$, що має спричинити сценарій поведінки намагніченості, цілком аналогічний показаному на рис. 6.7 (і) із послідовністю чотирьох фазових переходів, керованих полем $|V\rangle - |VI\rangle - |I\rangle - |III\rangle - |IV\rangle$. Низькопольова частина кривої намагніченості повинна

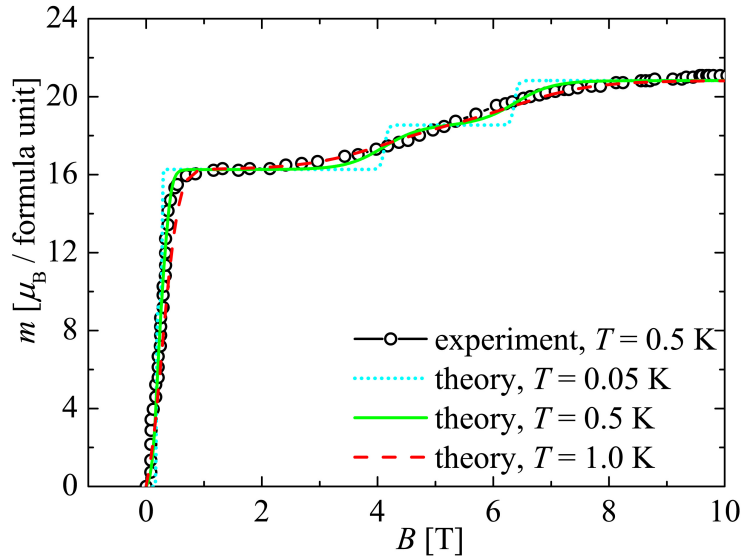


Рис. 6.8. Порівняння кривої намагніченості полімерної сполуки $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$, виміряної в імпульсних магнітних полях до 10 Т при температурі $T = 0.5$ К (чорна суцільна лінія з незамкненими колами) адаптовано з посилання [212]) і найкраща теоретична відповідність, отримана за допомогою моделі (6.15) із таким набором параметрів: $J_{\text{I}}/k_{\text{B}} = 8.02$ К, $J'_{\text{I}}/k_{\text{B}} = 17.35$ К, $J_{\text{H}}/k_{\text{B}} = 1.73$ К, $g_{\text{H}} = 2.28$ і $g_{\text{I}} = 18.54$. Теоретичні результати для кривих ізотермічної намагніченості також представлені для дуже низької температури $T = 0.05$ К (блакитна пунктирна лінія) і трохи вищої температури $T = 1.0$ К (червона штрихована лінія) на додаток до температури $T = 0.5$ К (суцільна зелена лінія), що відповідає відображеним експериментальним даним.

відповідно відображати два вузьких плато при нульовій і приблизно $5/11$ намагніченості насичення (зверніть увагу, що гіромагнітні фактори трохи відхиляються від ідеальних значень $g_{\text{H}} = 2.0$ і $g_{\text{I}} = 20.0$), які повністю розмиваються тепловими флуктуаціями при таких низьких температурах, як $T \gtrsim 0.5$ К через крихітні енергетичні щілини фаз $|V\rangle$ і $|VI\rangle$. По суті, плато нульової намагніченості, що відповідає фрустрованій квантовій антиферромагнітній фазі $|V\rangle$, обмежене магнітними полями, меншими за 0.17 Т, тоді як плато $5/11$, пов'язане з модульованою квантовою феримагнітною фазою $|VI\rangle$, обмежене діапазоном магнітного поля 0.17–0.28 Т.

З іншого боку, високопольова частина кривої намагніченості повинна демонструвати два ширших проміжних плато приблизно на $9/11$ - і $10/11$ намагніченості насичення. Плато $9/11$, що відноситься до класичної феримагнітної фази $|I\rangle$,

є стабільним в діапазоні магнітного поля 0.28–4.12 Т, тоді як плато 10/11, яке приписується квантовій феримагнітній фазі $|III\rangle$ стабільна в діапазоні магнітного поля 4.12–6.37 Т. У зв'язку з цим виглядає досить загадковим те, що керований полем перехід між класичною та квантовою феримагнітними фазами неможливо чітко вирізнити з даних намагніченості, записаних для полімерної сполуки $[Dy_2Cu_2]_n$ при відносно низькій температурі $T = 0.5$ К, оскільки обидва основні стани $|I\rangle$ і $|III\rangle$ зі значною енергетичною щільністю повинні бути досить стійкими щодо теплового згладжування. Можна припустити дві можливі причини невідповідності між експериментальними даними намагніченості, зареєстрованими при температурі $T = 0.5$ К, і відповідним теоретичним припасаванням: або зразок полімерної сполуки $[Dy_2Cu_2]_n$ не зберігався під час процесу намагнічування в ідеальних ізотермічних умовах, оскільки невелике нагрівання (наприклад, через магнетокалоричний ефект) могло розв'язати цю розбіжність, про що свідчить теоретична крива, розрахована для трохи вищої температури $T = 1.0$ К, або ця відмінність має власне походження і зумовлене двома різними шляхами обміну між Dy^{3+} - Cu^{2+} магнітними іонами, якими нехтують у моделі (6.15).

6.2. Ефективні моделі та теорія збурень для одновимірних моделей

Звичайна теорія сильного зв'язку [241], яка базується на теорії збурень багатьох частинок [242], починається з розкладу навколо границі ізольованих димерів, чи інших кластерів. Збіжність такого підходу сильно залежить від величини взаємодії між кластерами, і може вимагати розкладів вищого порядку в загальному вигляді. Ми ж пропонуємо теорію збурень, яка ґрунтується на точних розв'язках гібридних моделей Ізинґа-Гайзенберґа, в якій XU частина міждиммерної взаємодії розглядається як збурення. Далі ми розвинемо теорію збурень для спінів-1/2 ортогонально-диммерного ланцюжка Гайзенберґа на основі точно розв'язної відповідної моделі Ізинґа-Гайзенберґа, розглядаючи окремо макроскопічно вироджений основний стан на кожній з його міжфазних меж [25] (підрозділ 6.2.1). Аналогічна

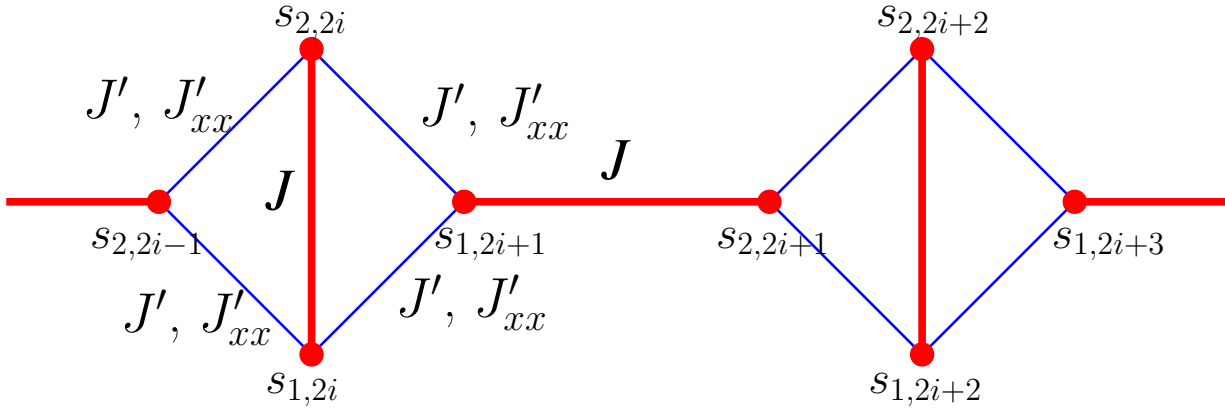


Рис. 6.9. Схематичне зображення ортогонально-димерного ланцюжка з позначеними димерними і міждимерними взаємодіями.

схема також запропонована для тримеризованого ланцюжка [28] (підрозділ 6.2.1).

6.2.1. Дробові плато намагніченості та квантові фази ортогонально-димерного ланцюжка Гайзенберґа

Розгляньмо квантовий спін-1/2 ортогонально-димерний ланцюжок Гайзенберґа з гамільтоніаном:

$$\begin{aligned}
 H = & \sum_{i=1}^N [J(\mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i}) - h(s_{1,i}^z + s_{2,i}^z)] \\
 & + \sum_{i=1}^{N/2} J'(\mathbf{s}_{1,2i} + \mathbf{s}_{2,2i}) \cdot (\mathbf{s}_{2,2i-1} + \mathbf{s}_{1,2i+1}), \quad (6.23)
 \end{aligned}$$

який включає константи взаємодії J і J' , що враховують димерні та міждимерні взаємодії Гайзенберґа, відповідно (див. рис. 6.9 для схематичної ілюстрації розглянутої магнітної ґратки). Відомо, що така модель (6.23), має основний стан синглетних димерів для $J' < 0.819J$ [124] при нульовому магнітному полі та виявляє особливий нескінченний ряд дробових плато намагніченості між $1/4$ і $1/2$ намагніченості насичення [120, 121].

Існування точного розв'язку для ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа дозволяє розвинути наближений підхід для аналогічної моделі Гай-

зенберга, де ми будемо трактувати XU частину міждимерної взаємодії як збурення. З цією метою розкладемо загальний гамільтоніан (6.23) моделі на дві частини

$$H = H^{(0)} + H^{(1)} = \sum_{i=1}^N H_i^{(0)} + \sum_{i=1}^N H_i^{(1)}, \quad (6.24)$$

де незбурена (ідеальна) частина $H^{(0)}$ відповідає точно розв'язному ортогонально-димерному ланцюжку Ізинга-Гайзенберга (6.1), записаного у такій формі

$$\begin{aligned} H_{2i}^{(0)} &= J(\mathbf{s}_{1,2i} \cdot \mathbf{s}_{2,2i}) - h_c(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z), \\ H_{2i+1}^{(0)} &= J'[(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z)s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z(s_{1,2i+2}^z + s_{2,2i+2}^z)] \\ &\quad + J(\mathbf{s}_{1,2i+1} \cdot \mathbf{s}_{2,2i+1}) - h_c(s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z), \end{aligned} \quad (6.25)$$

в той час як інша збурена частина $H^{(1)}$ містить решту доданків повного гамільтоніану (6.23)

$$\begin{aligned} H_{2i}^{(1)} &= (h_c - h)(s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z) + J'_{xx} \sum_{\alpha=x,y} (s_{1,2i}^\alpha + s_{2,2i}^\alpha)(s_{2,2i-1}^\alpha + s_{1,2i+1}^\alpha), \\ H_{2i+1}^{(1)} &= (h_c - h)(s_{1,2i+1}^z + s_{2,2i+1}^z). \end{aligned} \quad (6.26)$$

Слід зазначити, що гамільтоніан збурення $H^{(1)}$ окрім XU частини міждимерного зв'язку також включає різницю між справжнім магнітним полем h та його відповідним критичним значенням h_c , навколо кожного з яких слід окремо виконати пертурбативний розклад через макроскопічне виродження основного стану моделі (див. розділ 6.1 та [22]). Хоча ми явно виділили XU частину міждимерної взаємодії J'_{xx} , ізотропну границю квантової моделі Гайзенберга буде пізніше відновлено, покладаючи $J'_{xx} = J'$ в усіх кінцевих виразах. Крім того, наш подальший розгляд буде обмежений лише найцікавішим випадком з антиферромагнітними взаємодіями $J, J' > 0$ за одночасного обмеження $J' < 0.819J$, що відповідає синглет-димерній фазі за відсутності полі в основному стані моделі [124].

З огляду на подальшу методологію пертурбативного підходу наводимо тут точний розв'язок ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга (6.1), використовуючи проєкційні оператори. Для цього введемо спочатку базис димерного

стану

$$\begin{aligned}
|0\rangle_i &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{1,i}|\downarrow\rangle_{2,i} - |\downarrow\rangle_{1,i}|\uparrow\rangle_{2,i}), \\
|1\rangle_i &= |\uparrow\rangle_{1,i}|\uparrow\rangle_{2,i}, \\
|2\rangle_i &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{1,i}|\downarrow\rangle_{2,i} + |\downarrow\rangle_{1,i}|\uparrow\rangle_{2,i}), \\
|3\rangle_i &= |\downarrow\rangle_{1,i}|\downarrow\rangle_{2,i},
\end{aligned} \tag{6.27}$$

і відповідні проекційні оператори [325, 348, 349]

$$A_i^{ab} = |a\rangle_i \langle b|_i. \tag{6.28}$$

Представлення спінових операторів можна знайти через введені проекційні оператори A_i^{ab} (явну відповідність наведено в додатку статті [25]) і переписати через ці оператори локальні гамільтоніани (6.25):

$$\begin{aligned}
H_{2i}^{(0)} &= J\left(\frac{1}{4} - A_{2i}^{00}\right) - h_c(A_{2i}^{11} - A_{2i}^{33}), \\
H_{2i+1}^{(0)} &= J\left(\frac{1}{4} - A_{2i+1}^{00}\right) - h_c(A_{2i+1}^{11} - A_{2i+1}^{33}) \\
&\quad + \frac{J'}{2} [(S_{2i}^z + S_{2i+2}^z)(A_{2i+1}^{11} - A_{2i+1}^{33}) \\
&\quad + (S_{2i}^z - S_{2i+2}^z)(A_{2i+1}^{20} + A_{2i+1}^{02})].
\end{aligned} \tag{6.29}$$

Тут $S_{2i}^z = s_{1,2i}^z + s_{2,2i}^z = A_{2i}^{11} - A_{2i}^{33}$ позначає z -компоненту повного спіну на $(2i)$ -му вертикальному димері, тоді як явний вигляд повного спіну S_{2i}^z і S_{2i+2}^z на двох сусідніх вертикальних димерах збережено у рівнянні (6.30) задля компактності. Цілковито очевидно, що гамільтоніани $H_{2i}^{(0)}$ вертикальних димерів (6.29) вже є діагональними в представленні димерів, тоді як гамільтоніани $H_{2i+1}^{(0)}$ горизонтальних димерів (6.30) можна діагоналізувати унітарним перетворенням:

$$\begin{aligned}
U_{2i+1} &= (A_{2i+1}^{11} + A_{2i+1}^{33}) + \cos \frac{\alpha_{2i+1}}{2} (A_{2i+1}^{00} + A_{2i+1}^{22}) \\
&\quad + \sin \frac{\alpha_{2i+1}}{2} (A_{2i+1}^{20} - A_{2i+1}^{02}), \\
\cos \alpha_{2i+1} &= \frac{J}{\sqrt{J^2 + J'^2 (S_{2i}^z - S_{2i+2}^z)^2}},
\end{aligned}$$

$$\sin \alpha_{2i+1} = \frac{J'(S_{2i}^z - S_{2i+2}^z)}{\sqrt{J^2 + J'^2(S_{2i}^z - S_{2i+2}^z)^2}}. \quad (6.31)$$

Слід підкреслити, що $\cos \alpha_{2i+1}$ і $\sin \alpha_{2i+1}$ залежать від власних значень операторів S_{2i}^z , S_{2i+2}^z , і їх можна звести до алгебраїчної форми за допомогою тотожності ван дер Вардена (див., наприклад, [350, 351]). Явні вирази для $\cos \frac{\alpha_{2i+1}}{2}$ і $\sin \frac{\alpha_{2i+1}}{2}$ наведено в додатку статті [25]). Очевидно, два поляризованих триплетних стани $|1\rangle$ і $|3\rangle$ є інваріантними щодо унітарного перетворення (6.31), тоді як синглет $|0\rangle$ і нуль-компонента триплетний стан $|2\rangle$ взаємно заплутаний у більш складний квантовий стан:

$$\begin{aligned} |\tilde{0}\rangle_{2i+1} &= U_{2i+1}|0\rangle_{2i+1} \\ &= \cos \frac{\alpha_{2i+1}}{2}|0\rangle_{2i+1} + \sin \frac{\alpha_{2i+1}}{2}|2\rangle_{2i+1}, \\ |\tilde{2}\rangle_{2i+1} &= U_{2i+1}|2\rangle_{2i+1} \\ &= -\sin \frac{\alpha_{2i+1}}{2}|0\rangle_{2i+1} + \cos \frac{\alpha_{2i+1}}{2}|2\rangle_{2i+1}. \end{aligned} \quad (6.32)$$

Після застосування локального унітарного перетворення (6.31) отримуємо діагональну форму гамільтоніана $\tilde{H}_{2i+1}^{(0)} = U_{2i+1}H_{2i+1}^{(0)}U_{2i+1}^+$ $(2i+1)$ -го горизонтального димера

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{2i+1}^{(0)} &= \left(\frac{J'(S_{2i}^z + S_{2i+2}^z)}{2} - h_c \right) (A_{2i+1}^{11} - A_{2i+1}^{33}) + J \left(\frac{1}{4} - A_{2i+1}^{00} \right) \\ &\quad + \frac{1}{2} I(|S_{2i}^z - S_{2i+2}^z|) (A_{2i+1}^{22} - A_{2i+1}^{00}), \\ I(|S_{2i}^z - S_{2i+2}^z|) &= \delta(|S_{2i}^z - S_{2i+2}^z| - 1) (\sqrt{J^2 + J'^2} - J) \\ &\quad + \delta(|S_{2i}^z - S_{2i+2}^z| - 2) (\sqrt{J^2 + 4J'^2} - J). \end{aligned} \quad (6.33)$$

Тут $\delta(\dots)$ є символічним позначенням дельта-символа Кронекера.

Варто нагадати, що основний стан є макроскопічно виродженим у критичних полях, де намагніченість стрибає внаслідок послідовних індукованих полем фазових переходів (першого роду) $SD \rightarrow MFI \rightarrow SB \rightarrow SAT$ при зростанні магнітного поля. Явна форма критичних полів для випадку анізотропної XXZ взаємодії Гайзенберга у гамільтоніані, що відповідають відповідним фазовим межах основ-

ного стану, була знайдена вище в підрозділі 6.1 (див. також роботу [22]). Тут ми наводимо спрощений результат для ізотропного випадку:

- SD-MFI: $h_{c1} = 2J - \sqrt{J^2 + J'^2}$,
- MFI-SB: $h_{c2} = \sqrt{J^2 + J'^2}$,
- SB-SAT: $h_{c3} = J + J'$.

Розмаїття основного стану разом із його макроскопічним виродженням при заданому критичному полі можна отримати з умови співіснування фаз обох окремих основних станів. Наприклад, усі горизонтальні димери мають бути у квазісинглетному стані $|\tilde{0}\rangle_{2i-1}$ на межі SD-MFI, тоді як поляризований триплетний стан $|\tilde{1}\rangle_{2i}$ може бути випадковим чином локалізований на вертикальних димерах за припущення, що задовольняється умові жорсткого відштовхування між найближчими сусідніми поляризованими станами на вертикальних димерах (решта вертикальних димерів має бути у квазісинглетному стані $|\tilde{0}\rangle_{2i}$). Таким чином, множину основних станів на межі фаз SD-MFI можна визначити за допомогою наступного оператора проєкції:

$$P_{SD-MFI} = \prod_{i=1}^{N/2} A_{2i-1}^{00} (A_{2i}^{00} + A_{2i-2}^{00} A_{2i}^{11} A_{2i+2}^{00}). \quad (6.34)$$

Подібним чином множина основних станів на межі SB-SAT може бути побудована з будь-якої випадкової конфігурації квазісинглетних станів $|\tilde{0}\rangle_{2i-1}$ і $|\tilde{0}\rangle_{2i}$ на горизонтальних і вертикальних димерах, що задовольняє жорстке відштовхування між синглетно подібними станами на найближчих сусідніх димерах (решта димерів повинна займати поляризовані триплетні стани $|\tilde{1}\rangle_{2i-1}$ і $|\tilde{1}\rangle_{2i}$). Таким чином, множина основних станів на межі фаз SB-SAT задається наступним оператором проєкції:

$$P_{SB-SAT} = \prod_{i=1}^N (A_i^{11} + A_{i-1}^{11} A_i^{00} A_{i+1}^{11}). \quad (6.35)$$

Ситуація на межі фаз MFI-SB набагато складніша, і вона не дозволяє отримати таке ж просте представлення. Множина основних станів на межі фаз MFI-SB

можна визначити за допомогою оператора проекції наступним чином:

$$P_{MFI-SB} = \prod_{i=1}^{N/2} [A_{2i-2}^{00} A_{2i-1}^{11} A_{2i}^{00} + A_{2i-1}^{00} (A_{2i-2}^{11} A_{2i}^{00} + A_{2i-2}^{00} A_{2i}^{11} + A_{2i-2}^{11} A_{2i}^{11})]. \quad (6.36)$$

Границя SD-MFI між основними станами SD і MFI ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга визначається критичним полем h_{c1} , а оператор проекції на макроскопічно вироджений основний стан визначається рівнянням (6.34). Пряме застосування багаточастинкової теорії збурень (1.18) призводить до члена першого порядку:

$$\begin{aligned} H_{eff}^{(1)} &= P_{SD-MFI} \tilde{H}^{(1)} P_{SD-MFI} \\ &= (h_{c1} - h) \left(\sum_{i=1}^{N/2} A_{2i}^{11} \right) P_{SD-MFI}, \end{aligned} \quad (6.37)$$

де $\tilde{H}^{(1)} = U H^{(1)} U$ — оператор збурення з унітарним перетворенням. Доданок другого порядку $H_{eff}^{(2)}$ вимагає обчислення елементів матриці та є набагато складнішим (див. деталі обчислень у додатку статті [25]):

$$\begin{aligned} H_{eff}^{(2)} &= \sum_{i=1}^{N/2} h^{(2)} A_{2i}^{11} P_{SD-MFI}, \\ h^{(2)} &= -\frac{(J'_{xx})^2 (c_1^+ + c_1^-)^2}{2} \left\{ \frac{(c_1^+)^2}{\sqrt{J^2 + J'^2}} + \frac{(c_1^-)^2}{J + \sqrt{J^2 + J'^2}} \right\}, \end{aligned} \quad (6.38)$$

$$c_1^\pm = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \frac{J}{\sqrt{J^2 + J'^2}}}. \quad (6.39)$$

Підсумовуючи всі вклади до другого порядку включно, отримаємо такий ефективний гамільтоніан:

$$H_{eff} = \sum_{i=1}^{N/2} (h_{c1} + h^{(2)} - h) A_{2i}^{11} P_{SD-MFI}. \quad (6.40)$$

Очевидно, що ефективний гамільтоніан (6.40) є по суті одновимірною класичною моделлю з простою відповідністю відображення моделі ґраткового газу, яку можна встановити, розглядаючи синглетноподібні (поляризовані триплетні) стани

на вертикальних димерах як порожні (заповнені) вузли: $|0\rangle \rightarrow$ порожній вузол, $|1\rangle \rightarrow$ заповнений вузол, $A_{2i}^{00} = (1-n_i)$, $A_{2i}^{11} = n_i$. Ефективний гамільтоніан у представленні ґраткового газу є надзвичайно простим і задовольняє умову жорсткого відштовхування для поляризованих триплетних станів на найближчих сусідніх вертикальних димерах, як продиктовано оператором проекції (6.34):

$$H_{eff} = \sum_{i=1}^{N/2} (h_{c1} + h^{(2)} - h)(1 - n_{i-1})n_i(1 - n_{i+1}). \quad (6.41)$$

Основний стан відповідає або моделі ґраткового газу з усіма порожніми вузлами для $h < h_{c1} + h^{(2)}$, або напівзаповненому випадку для $h > h_{c1} + h^{(2)}$. Перша умова з усіма порожніми вузлами ($n_i = 0$ для всіх i) узгоджується з основним станом SD початкової спінової моделі (6.23), тоді як остання умова з регулярним чергуванням порожніх і заповнених вузлів, очевидно, відповідає фазі MFI. Таким чином, можна зробити висновок, що пертурбативний розклад другого порядку навколо фазової межі SD-MFI не створює жодного нового основного стану, а лише перенормує критичне поле $h_{c1} + h^{(2)}$ фазового переходу між основними станами SD і MFI, що супроводжується стрибком намагніченості від нуля до $1/4$ намагніченості насичення. Цілком очевидно з рівняння (6.38), що поправка другого порядку до першого критичного поля є негативною ($h^{(2)} < 0$), яка зсувається до нижчих значень магнітного поля у чудовій відповідності до сучасних числових даних методів DMRG і точної діагоналізації (див. рис. 6.10 і 6.11).

Границя між основними станами MFI та SB ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа виникає у другому критичному полі h_{c2} , у якому проектор (6.40) визначає макроскопічно вироджений основний стан. Щоб отримати ефективний гамільтоніан, можна використати ту саму процедуру, що й раніше. Внесок першого порядку в ефективний гамільтоніан визначається діагональними елементами збуреної частини гамільтоніана:

$$H_{eff}^{(1)} = (h_{c2} - h) \left(\sum_{i=1}^{N/2} A_{2i}^{11} \right) P_{MFI-SB}. \quad (6.42)$$

Після громіздких обчислень отримуємо такий результат для вкладу другого по-

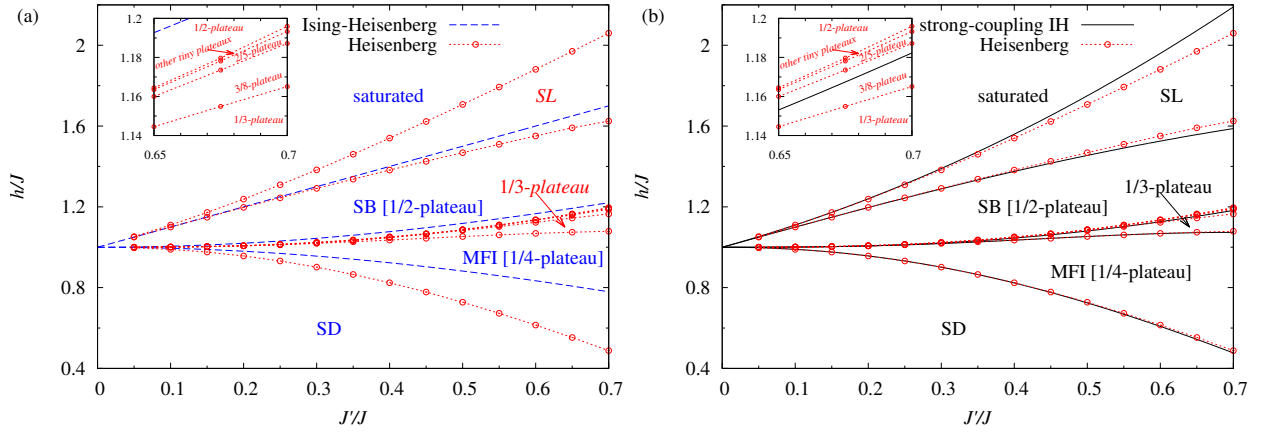


Рис. 6.10. Фазова діаграма основного стану ортогонального-димерного ланцюжка у площині $J'/J - h/J$: (a) точні результати для моделі Ізинга-Гайзенберга (штрихові лінії) проти числових даних для моделі Гайзенберга (пунктирні лінії з символами); (b) пертурбативний підхід сильного зв'язку (суцільні лінії) проти числових даних (пунктирні лінії з символами) для моделі Гайзенберга.

рядку до ефективного гамільтоніану:

$$\begin{aligned}
 H_{eff}^{(2)} &= \sum_{i=1}^{N/2} \left\{ D_{00} A_{2i-2}^{00} A_{2i+2}^{00} + D_{11} A_{2i-2}^{11} A_{2i+2}^{11} \right. \\
 &\quad \left. + D_{01} (A_{2i-2}^{11} A_{2i+2}^{00} + A_{2i-2}^{00} A_{2i+2}^{11}) \right\} A_{2i}^{11} P_{MFI-SB}, \\
 D_{00} &= -\frac{(J'_{xx})^2 (c_1^+ + c_1^-)^2}{2} \left(\frac{(c_1^+)^2}{\sqrt{J^2 + J'^2}} + \frac{(c_1^-)^2}{J + \sqrt{J^2 + J'^2}} \right), \\
 D_{11} &= -(J'_{xx})^2 \left(\frac{(c_1^+)^2}{3J + J' - \sqrt{J^2 + J'^2}} + \frac{(c_1^-)^2}{3J + J' + \sqrt{J^2 + J'^2}} \right), \\
 D_{01} &= -\frac{(J'_{xx})^2}{4} \left\{ \frac{2(c_1^+)^2}{J + J' + \sqrt{J^2 + J'^2}} + \frac{2(c_1^-)^2}{3J + J' + \sqrt{J^2 + J'^2}} \right. \\
 &\quad \left. + (c_1^+ + c_1^-)^2 \left(\frac{(c_1^+)^2}{J} + \frac{(c_1^-)^2}{J + \sqrt{J^2 + J'^2}} \right) \right\}. \tag{6.43}
 \end{aligned}$$

Оскільки всі три коефіцієнти розкладу від'ємні ($D_{00}, D_{11}, D_{01} < 0$), очевидно маємо $\langle H_{eff}^{(2)} \rangle \leq 0$ і $\langle H_{eff}^{(2)} \rangle = 0$, якщо горизонтальні димери перебувають в синглетно подібних станах. Досить просто показати, що основний стан відповідає стану з $|0\rangle_{2i-1}$, тобто $A_{2i-1}^{11} |GS\rangle = 0$. Тому стани з поляризованими горизонтальними триплетами можна виключити з розгляду, якщо ми шукаємо лише основний стан. Введемо позначення $A_{2i}^{00} = n_i$, $A_{2i}^{11} = (1 - n_i)$, щоб переписати гамільтоніан (6.43)

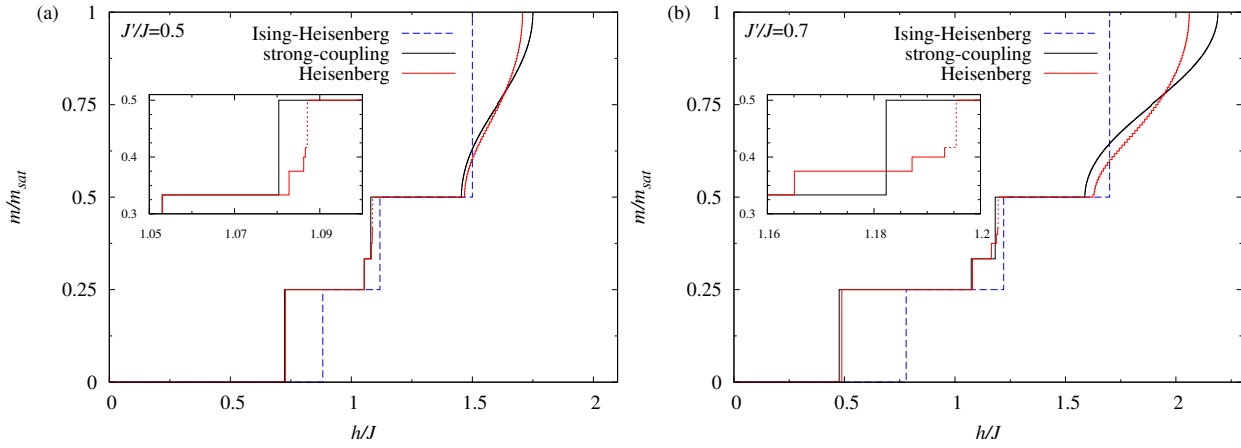


Рис. 6.11. Порівняння точної кривої намагніченості при нульовій температурі ортогонального-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа (штриховані лінії) з кривою намагніченості при нульовій температурі відповідного ланцюжка Гайзенберґа, отриманої в межах підходу сильного зв'язку (чорні суцільні лінії) та числового методу DMRG (червоні суцільні лінії) для двох різних значень співвідношення взаємодії: (a) $J'/J = 0.5$; (b) $J'/J = 0.7$. На вставках ми показуємо у збільшеному масштабі область поля з нескінченною послідовністю дробових плато, тоді як пунктирною лінією позначено випадок, коли крихітні плато намагніченості при $n/(2n+2)$ стають нерозрізненими для $n > 5$ в межах обраного масштабу.

у представленні ґраткового газу:

$$\begin{aligned}
 H_{eff} = & \sum_{i=1}^{N/2} [D_{11} + h_{c2} - h + (2D_{01} - 3D_{11} - h_{c2} + h)n_i \\
 & + (D_{00} + D_{11} - 2D_{01})n_{i-1}n_{i+1}] P_{MFI-SB}.
 \end{aligned} \tag{6.44}$$

Подібно до попереднього випадку отримуємо класичний ефективний гамільтоніан із жорстким міжчастинковим відштовхуванням, але також з'являється додаткова взаємодія наступних після найближчих сусідів. При пошуку найнижчих енергетичних станів ефективної моделі ґраткового газу, заданої гамільтоніаном (6.44), можна знайти три різні основні стани або з порожніми, заповненими на одну третину або наполовину заповненими станами після зміни зовнішнього магнітного поля. Ці стани з найнижчою енергією відповідають частковим плато на $1/2$, $1/3$ або $1/4$ намагніченості насичення, тоді як дві умови співіснування фази визнача-

ють критичні поля, пов'язані з відповідними стрибками намагніченості:

$$\begin{aligned} h(1/4 \rightarrow 1/3) &= h_{c2} + 4D_{01} - 3D_{00}, \\ h(1/3 \rightarrow 1/2) &= h_{c2} + 3D_{11} - 2D_{01}. \end{aligned} \quad (6.45)$$

Розклад теорії збурень навколо фазової границі MFI-SB підтверджує існування дробового плато намагніченості $1/3$, яке відсутнє на кривій намагніченості при нульовій температурі ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга (див. рис. 6.11(a)). Крім того, наш метод також дозволяє зрозуміти мікроскопічну природу спінового розташування, реалізованого в межах $1/3$ -плато, в якому квазісинглетні стани розподіляються по всіх горизонтальних димерах і кожному третьому вертикальному димеру. З рис. 6.10(b) видно, що розроблена теорія збурень передбачає критичне поле $h(1/4 \rightarrow 1/3)$ між плато $1/4$ і $1/3$ в ідеально узгоджується з числовими результатами, тоді як інше критичне поле $h(1/3 \rightarrow 1/2)$ між плато $1/3$ і $1/2$ лежить у середині крихітної області, що включає нескінченну послідовність плато дробової намагніченості $n/(2n + 2)$. Очевидно, що інші крихітні часткові плато намагніченості також можуть бути відтворені, якщо розклад теорії збурень буде виконано до вищих порядків. У цьому випадку з'являється відштовхування між подальшими сусідами в представленні ґраткового газу, що призводить до заповнених на $1/4, 1/5, \dots$ станів. Ці стани відповідають $3/8$ -, $2/5$ -плато в оригінальній спіновій моделі з використанням співвідношення $m/m_{sat} = (1 - \langle n_i \rangle)/2$.

Фазова межа між основними станами SB і SAT ортогонально-димерного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга являє собою особливий випадок, оскільки пертурбативний підхід сильного зв'язку призведе в цьому конкретному випадку до ефективного гамільтоніана квантової природи. Критичне поле, що відповідає цій фазовій межі, задано $h_{c3} = J + J'$, тоді як макроскопічно вироджений основний стан визначається оператором проекції (6.35). Застосовуючи теорію збурень, можна отримати наступний внесок першого порядку в ефективний гамільтоніан:

$$H_{eff}^{(1)} = (h_{c3} - h) \left(\sum_{i=1}^N A_i^{11} \right) P_{SB-SAT}. \quad (6.46)$$

Після громіздких обчислень можна також знайти член збурення другого порядку:

$$H_{eff}^{(2)} = \sum_{i=1}^{N/2} P_{SB-SAT} \{ L_1 (A_{2i-1}^{00} A_{2i+1}^{11} + A_{2i-1}^{11} A_{2i+1}^{00} - A_{2i-1}^{10} A_{2i+1}^{01} - A_{2i-1}^{01} A_{2i+1}^{10}) + L_0 A_{2i-1}^{00} A_{2i+1}^{00} \} P_{SB-SAT}, \quad (6.47)$$

де запроваджено такі позначення для коефіцієнтів:

$$L_0 = -\frac{(J'_{xx})^2}{2J} \frac{4J + J'}{4J + 3J'} \quad \text{і} \quad L_1 = -\frac{(J'_{xx})^2}{4J}. \quad (6.48)$$

Далі перейдемо до поняття квантового ґраткового газу, отриманого за допомогою наступного перетворення: $A_i^{00} = n_i$, $A_i^{11} = (1 - n_i)$, $A_i^{01} = a_i^+$, $A_i^{10} = a_i$ (a_i і a_i^+ — це оператори Паулі, які антикомутують на одному вузлі та комутують на різних вузлах). Загальний ефективний гамільтоніан може бути згодом переписаний у представленні частинок як:

$$H_{eff} = \sum_{i=1}^{N/2} P_{SB-SAT} \{ (h - h_{c3}) n_{2i} + (h - h_{c3} + 2L_1) n_{2i+1} + (L_0 - 2L_1) n_{2i-1} n_{2i+1} - L_1 (a_{2i-1}^+ a_{2i+1} + a_{2i-1} a_{2i+1}^+) \} P_{SB-SAT}. \quad (6.49)$$

Ефективна квантова модель ґраткового газу (6.49) містить два типи частинок. Частинки на непарних вузлах рухливі й перескакують між найближчими сусідніми непарними вузлами, тоді як частинки на парних вузлах локалізовані. Оператор проєкції (6.35) додатково призводить до жорсткого відштовхування, яке блокує заняття найближчих сусідніх вузлів. Щоб отримати основний стан, потрібно знайти таку конфігурацію локалізованих частинок на парних вузлах, заданих набором чисел заповнення $\{n_{2i}\}$, яка відповідає власному стану з найнижчою енергією квантової підсистеми на непарних вузлах. Варто зазначити, що відповідна квантова частина розбивається на два відкриті ланцюжки в кожному парному вузлі $n_{2i} = 1$, зайнятому частинкою, тоді як зайнятість сусідніх непарних вузлів $2i - 1$ і $2i + 1$ повинна бути виключена ($n_{2i-1} = n_{2i+1} = 0$). Далі ми покажемо, що енергія системи зростає щоразу, коли порожнє парне місце змінюється на заповнене (тобто n_{2i} змінюється з 0 на 1). Цей факт необхідно довести окремо для двох

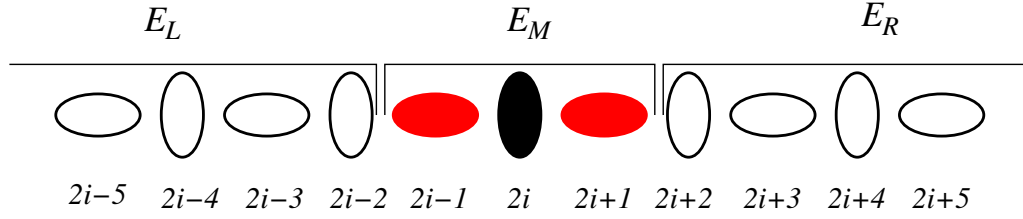


Рис. 6.12. Схематичне представлення моделі ефективного квантового ґраткового газу (6.49). Чорний еліпс позначає синглетний стан вертикального димера, червоні еліпси — сусідні горизонтальні димери, де синглетний стан заборонений через жорстке відштовхування.

випадків: $h > h_{c3}$ і $h < h_{c3}$. Позначимо через $E_{0(1)}$ енергію для порожнього (заповненого) парного вузла $n_{2i} = 0(1)$. З попередніх аргументів цілком зрозуміло, що $E_1 = E_L + E_R + (h - h_{c3})$, де E_L і E_R — найнижчі енергії лівої та правої частин системи, розділені на $n_{2i} = 1$ (див. рис. 6.12). Можна отримати нерівність $E_0 \leq E_L + E_R$, яка для $h > h_{c3}$ доводить, що

$$E_0 \leq E_1 + h_{c3} - h < E_1. \quad (6.50)$$

У протилежному випадку $h < h_{c3}$ ми маємо використати властивість, згідно з якою сума енергії основного стану двох окремих ланцюжків і кластерів є більшою за енергію основного стану всієї системи, яка виходить за допомогою об'єднання окремих підсистем. З цієї властивості випливає справедливості нерівності

$$E_0 \leq E_L + E_M + E_R. \quad (6.51)$$

Після деяких обчислень можна також показати, що виконується нерівність для $h < h_{c3}$

$$E_0 \leq E_1 + h - h_{c3} + 2L_1 < E_1. \quad (6.52)$$

Відповідно, основний стан має відповідати окремому випадку з усіма порожніми парними вузлами ($n_{2i} = 0$ для всіх i), тоді як ефективний гамільтоніан (6.49) квантової моделі ґраткового газу зводиться до

$$H_{eff} = \sum_{i=1}^{N/2} \{ (h - h_{c3} + 2L_1) n_{2i+1} + (L_0 - 2L_1) n_{2i-1} n_{2i+1} \}$$

$$-L_1(a_{2i-1}^+ a_{2i+1} + a_{2i-1} a_{2i+1}^+) \}. \quad (6.53)$$

Основний стан SAT відповідає порожньому стану на мові частинок ($n_{2i-1} = n_{2i} = 0$ для всіх i), тоді як виникає основний стан SB, дотичний до 1/2-плато, коли всі непарні вузли заповнені частинками, а всі парні вузли порожні ($n_{2i-1} = 1$, $n_{2i} = 0$ для всіх i). Щоб отримати відповідні значення критичних полів, зручніше переписати ефективну квантову модель ґраткового газу (6.53) на мові псевдоспінів. По суті, можна отримати ефективний гамільтоніан ланцюжка Гайзенберґа зі спіном-1/2 XXZ за допомогою $\tilde{s}_i^x = (a_{2i-1}^+ + a_{2i-1})/2$, $\tilde{s}_i^y = -i(a_{2i-1}^+ - a_{2i-1})/2$, $\tilde{s}_i^z = a_{2i-1}^+ a_{2i-1} - 1/2$:

$$\begin{aligned} H_{eff}^{xxz} &= \sum_{i=1}^{N/2} (J_{eff}^z \tilde{s}_i^z \tilde{s}_{i+1}^z + J_{eff}^{xx} (\tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x + \tilde{s}_i^y \tilde{s}_{i+1}^y) \\ &\quad - h_{eff} \tilde{s}_i^z), \\ J_{eff}^z &= \frac{(J'_{xx})^2 J'}{J(4J + 3J')} > 0, \\ J_{eff}^{xx} &= \frac{(J'_{xx})^2}{2J} > 0, \\ h_{eff} &= h_{c3} - L_0 - h. \end{aligned} \quad (6.54)$$

Враховавши, що критичні поля для квантового антиферромагнітного ланцюжка Гайзенберґа XXZ точно відомі: $h_{upper/lower} = \pm(J_{eff}^z + J_{eff}^{xx}) = \pm(L_0 - 4L_1)$, поле насичення h_{sat} і верхнє критичне поле $h_{1/2}$ для 1/2-плато можна знайти зі співвідношень

$$\begin{aligned} h_{1/2} &= h_{c3} - L_0 - h_{upper} = J + J' - \frac{2(J'_{xx})^2 J'}{J(4J + 3J')}, \\ h_{sat} &= h_{c3} - L_0 - h_{lower} = J + J' + \frac{(J'_{xx})^2}{J}. \end{aligned} \quad (6.55)$$

З рис. 6.10(b) видно, що обидва критичні поля $h_{1/2}$ і h_{sat} , отримані за допомогою пертурбативного підходу сильного зв'язку, кількісно узгоджуються з числовими даними DMRG при $J'/J \approx 0.5$, тоді як критичне поле $h_{1/2}$ (h_{sat}) трохи занижено (переоцінено) при $J'/J \gtrsim 0.5$. Найважливіше те, що пертурбативне розширення навколо фазової межі SB-SAT передбачає безщілинний основний стан спінової рідини (SL) Томонаґи-Латинджера у відносно широкому діапазоні магнітних полів

$h \in (h_{1/2}, h_{sat})$), незважаючи на те, що спрощена модель Ізинґа-Гайзенберґа взагалі не демонструє цей основний стан [порівняйте рис. 6.10(a) і (b)]. Слід також зазначити, що ортогонально-димерний ланцюжок Гайзенберґа зазнає квантових фазових переходів другого роду у критичних полях $h_{1/2}$ і h_{sat} , що розмежовують область стійкості основного стану SL на відміну від розривних фазових переходів першого роду, пов'язаних зі стрибками намагніченості між іншими дробовими плато (див. рис. 6.11). Пертурбативний підхід із сильним зв'язком дає змогу глибше зрозуміти характер фази SL, оскільки кількість непарних заповнених вузлів у ефективній моделі квантового ґраткового газу постійно зменшується зі збільшенням магнітного поля, зберігаючи всі парні вузли порожніми. Якщо повернутися до початкової моделі, цей результат означає, що загальна кількість (рухомих) синглетних станів на горизонтальних димерах поступово зменшується в основному стані SL від свого максимального значення при критичному полі $h_{1/2}$ до нуля при h_{sat} , зберігаючи всі вертикальні димери в поляризованому триплетному стані.

6.2.2. Теорія збурень для тримеризованої моделі Гайзенберґа та теоретичний опис сполуки $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$

Ще одним прикладом застосування нашого підходу є тримеризований ланцюжок з сильними димерними взаємодіями, який реалізується в полімерній сполуці $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$ [113, 114]. У згоді з правилом Ошікави-Яманаки-Афлека [110] такий квантовий ланцюжок, як і відповідна сполука, демонструють дробове $1/3$ плато намагніченості, яке має квантову природу. Далі покажемо, що хоча у самому тримеризованому ланцюжку відсутні фрустрації, ефективну теорію збурень потрібно будувати навколо точно розв'язного ромбічного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа.

Отже, розглядаємо квантовий спін-1/2 тримеризований ланцюжок Гайзенберґа (див. рис. 6.13(a)):

$$H = \sum_{i=1}^N [J_1 \mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i} + J_2 (\mathbf{s}_{2,i} \cdot \mathbf{s}_{3,i} + \mathbf{s}_{3,i} \cdot \mathbf{s}_{1,i+1})]$$

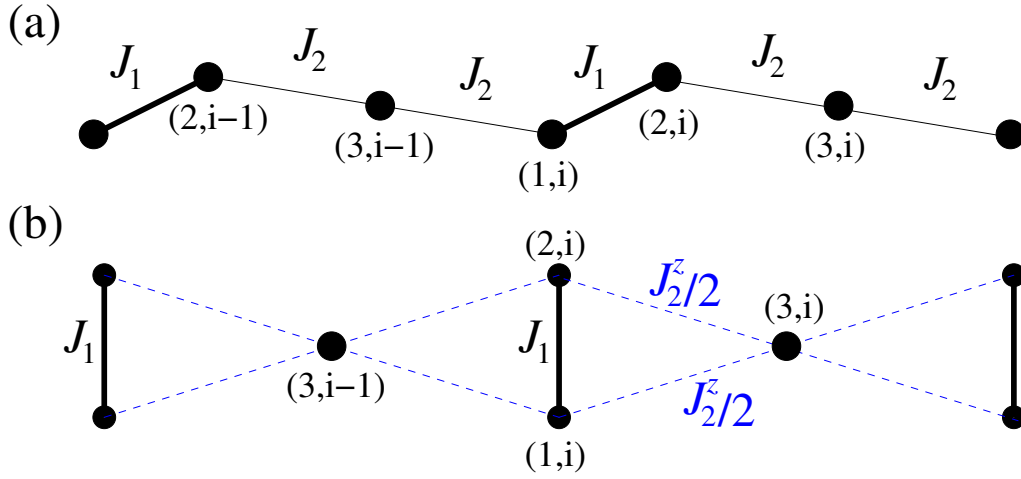


Рис. 6.13. Схематична ілюстрація тримеризованого ланцюжка Гайзенберга (6.56) (панель а) і ромбічного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберга (6.57) (панель б), що використовується для його ефективного опису в рамках розробленого підходу сильного зв'язку.

$$-h(s_{1,i}^z + s_{2,i}^z + s_{3,i}^z)], \quad (6.56)$$

де $\mathbf{s}_{m,i}^\alpha = (s_{m,i}^x, s_{m,i}^y, s_{m,i}^z)$ — спін-1/2 оператор на m -му вузлі i -ої елементарної комірки, $J_1 > 0$ і $J_2 > 0$ — дві різні антиферромагнітні взаємодії, які далі називаємо константами димерного і мономер-димерного зв'язку відповідно, $h = g\mu_B B$ — зовнішнє магнітне поле в одиницях енергії, g — фактор Ланде, μ_B — магнетон Бора, N — кількість елементарних комірок. Надалі розглядатимемо періодичні граничні умови. Покладаємо, що константа димерного зв'язку J_1 є значно сильнішою, ніж мономер-димерна константа J_2 , тобто $J_1 \gg J_2$, оскільки нас цікавить режим слабозв'язаних спінових димерів і мономерів.

Стандартний розклад теорії збурень починається з границі невзаємодіючих димерів і мономерів [352]. На противагу цьому, ми хотіли б строго врахувати принаймні деякі кореляції між димерним і мономерним спінами. Важливо підкреслити, що вибір незбуреного гамільтоніана не є тривіальною задачею. Початковим припущенням, заснованим на теорії збурень для ортогонально-димерного ланцюжка [25], був би спін-1/2 тримеризований ланцюжок Ізинґа-Гайзенберга, де слабші зв'язки J_2 обрано типу Ізинґа [353]. Однак ця гібридна квантова модель демонструє значне нульове плато, яке не може бути зруйноване збуренням через

XU частину мономер-димерної взаємодії J_2 , і, таким чином, демонструватиме нефізичну поведінку при малих магнітних полях. Отже, потрібно шукати таку модель серед класу точно розв'язних спінових ланцюжків, яка нагадує основні властивості тримеризованого ланцюжка Гайзенберга (6.56). У зв'язку з цим спін-1/2 ромбічний ланцюжок Ізинга-Гайзенберга [100] з макроскопічно виродженим основним станом у нульовому полі видається більш відповідним для розвитку багаточастинкової теорії збурень, яка досить строго враховує спінові кореляції між z -компонентами. У подальшому ми розділимо початковий гамільтоніан (6.56) на дві частини $H = H_{IH} + V$, тоді як незбурена частина H_{IH} відповідає точно розв'язному спін-1/2 ромбічному ланцюжку Ізинга-Гайзенберга (див. рис. 6.13(b)) [100]:

$$H_{IH} = \sum_{i=1}^N \left[J_1 \mathbf{s}_{1,i} \cdot \mathbf{s}_{2,i} + \frac{J_2^z}{2} (s_{1,i}^z + s_{2,i}^z)(s_{3,i-1}^z + s_{3,i}^z) - h' \sum_{m=1}^3 s_{m,i}^z \right], \quad (6.57)$$

а збурена частина V містить решту повного гамільтоніану (6.56):

$$V = \sum_{i=1}^N \left[J_2^{xy} \sum_{\alpha=x,y} (s_{2,i}^\alpha s_{3,i}^\alpha + s_{3,i}^\alpha s_{1,i+1}^\alpha) + \frac{J_2^z}{2} (s_{1,i}^z - s_{2,i}^z)(s_{3,i-1}^z - s_{3,i}^z) - (h - h') \sum_{m=1}^3 s_{m,i}^z \right]. \quad (6.58)$$

Параметр h' позначає критичне поле ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга, при якому змінюється основний стан. Він буде визначений окремо для двох конкретних випадків з макроскопічним виродженням основного стану, що виникає або в нульовому полі, або в полі насичення. Крім того, ми формально розрізняємо XU - і Z -компоненти константи мономер-димерної взаємодії, які в кінцевих виразах прирівнюються $J_2^{xy} = J_2^z = J_2$, щоб відновити ізотропний характер цієї обмінної взаємодії. За достатньо низьких магнітних полів основним станом спін-1/2 ромбічного ланцюжка $\frac{1}{2}$ Ізинга-Гайзенберга є мономер-димерна (MD) фаза, яка стає макроскопічно виродженою в нульовому полі через парамагнітний (вільний) характер мономерних спінів $\mathbf{s}_{3,i}$, ефективно розділеними синглетними станами димерних спінів $\mathbf{s}_{1,i} - \mathbf{s}_{2,i}$. Звичайно, будь-яке відмінне від нуля магнітне поле знімає

макроскопічне виродження фази MD, яке буде відновлено саме в полі насичення h_c , де димерні спіни $\mathbf{s}_{1,i} - \mathbf{s}_{2,i}$ зазнають зміни від синглетного до поляризованого триплетного стану. У зв'язку з цим, ми повинні розрізнити два часткові випадки, які потребують окремого розгляду: а) досить малі магнітні поля $h \ll h_c$; б) більш високі магнітні поля, достатньо близькі до поля насичення h_c .

а) Випадок малих полів, $0 \leq m \leq 1/3$

Теорія збурень другого порядку за V призводить до такого ефективного гамільтоніану:

$$\begin{aligned} H_{eff} &= \sum_{i=1}^N (J_{eff} \mathbf{s}_{3,i} \cdot \mathbf{s}_{3,i+1} - h \tilde{s}_{3,i}^z), \\ J_{eff} &= \frac{J_2^2}{2J_1 - J_2} > 0. \end{aligned} \quad (6.59)$$

При досить низьких полях спін-1/2 тримеризований ланцюжок Гайзенберга ефективно описується антиферромагнітним спін-1/2 ланцюжком Гайзенберга з ефективною взаємодією J_{eff} (6.59). Поле насичення цього ланцюжка (6.59), точно відоме та відповідає нижньому критичному полю фази 1/3-плато

$$h_{1/3}^l = 2J_{eff} = \frac{2J_2^2}{2J_1 - J_2}, \quad (6.60)$$

при якому всі мономерні спіни $\mathbf{s}_{3,i}$ стають повністю поляризовані у магнітному полі.

б) Випадок сильних полів, $1/3 \leq m \leq m_{sat}$

Далі ми розглянемо область сильних полів, де намагніченість змінюється від 1/3-плато до значення насичення. У полі насичення h_c тримеризований ланцюжок Гайзенберга є макроскопічно виродженим, оскільки димерні спіни $\mathbf{s}_{1,i} - \mathbf{s}_{2,i}$ можуть бути або в синглетному, або в поляризованому триплетному стані. У цьому конкретному випадку застосування теорії збурень призводить до ефективного спін-1/2 XXZ ланцюжка Гайзенберга:

$$H_{eff}^{xxz} = \sum_{i=1}^{N/2} \left[J_{eff}^z \tilde{s}_i^z \tilde{s}_{i+1}^z + J_{eff}^{xy} (\tilde{s}_i^x \tilde{s}_{i+1}^x + \tilde{s}_i^y \tilde{s}_{i+1}^y) - \tilde{h} \tilde{s}_i^z \right],$$

$$\begin{aligned}
J_{eff}^{xy} &= \frac{J_2^2}{2(2J_1 - J_2)} > 0, \\
J_{eff}^z &= \frac{J_2}{2J_1} J_{eff}^{xy}, \\
\tilde{h} &= h - J_1 - \frac{J_2}{2} - \frac{J_2^2}{4J_1}.
\end{aligned} \tag{6.61}$$

Псевдоспінові оператори \tilde{s}_i^α діють у просторі, де $|\downarrow\rangle_i$ ($|\uparrow\rangle_i$) відповідає синглетному стану $|0\rangle_i$ (поляризованому триплетному стану $|1\rangle_i$) i -ї димера $\mathbf{s}_{1,i} - \mathbf{s}_{2,i}$. Намагніченість основного стану спін- $\frac{1}{2}$ тримеризованого ланцюжка Гайзенберґа можна виразити через нові оператори за такою формулою:

$$m = \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N \sum_{m=1}^3 \langle s_{m,i}^z \rangle = \frac{1}{3N} \sum_{i=1}^N (1 + \langle \tilde{s}_i^z \rangle). \tag{6.62}$$

Відомо, що критичні поля ефективного спін- $\frac{1}{2}$ XXZ ланцюжка Гайзенберґа $\tilde{h}_\pm = \pm(J_{eff}^z + J_{eff}^{xx})$. Таким чином, для поля насичення та верхнього критичного поля фази $1/3$ плато отримуємо наступні результати:

$$\begin{aligned}
h_{SAT} &= J_1 + \frac{J_2}{2} + \frac{J_2^2}{2J_1 - J_2}, \\
h_{1/3}^u &= J_1 + \frac{J_2}{2} - \frac{J_2^3}{2J_1(2J_1 - J_2)}.
\end{aligned} \tag{6.63}$$

Спін- $1/2$ дисторсний ромбічний ланцюжок Гайзенберґа та тримеризований ланцюжок Гайзенберґа як його граничний випадок були раніше вивчені в статтях [352, 354, 356]. У випадку $J_2 < J_1$ він демонструє дві щільні фази, що відповідають плато $1/3$ і насичення, і безщільну фазу квантової спінової рідини, де намагніченість неперервно змінюється з полем (див. рис. 6.14). На фазовій діаграмі основного стану на рис. 6.14 порівнюються критичні поля, отримані за чотирма різними схемами розрахунку: розклади в ряд (суцільні лінії) [354], підхід другого порядку сильного зв'язку (штрихові лінії) [352, 355], схема збурення другого порядку, розроблена в цій роботі на основі ромбічного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа (пунктирні лінії) та числове моделювання DMRG (символи). Розклади у ряд для критичних полів [354] є дуже точним, за винятком нижнього критичного поля

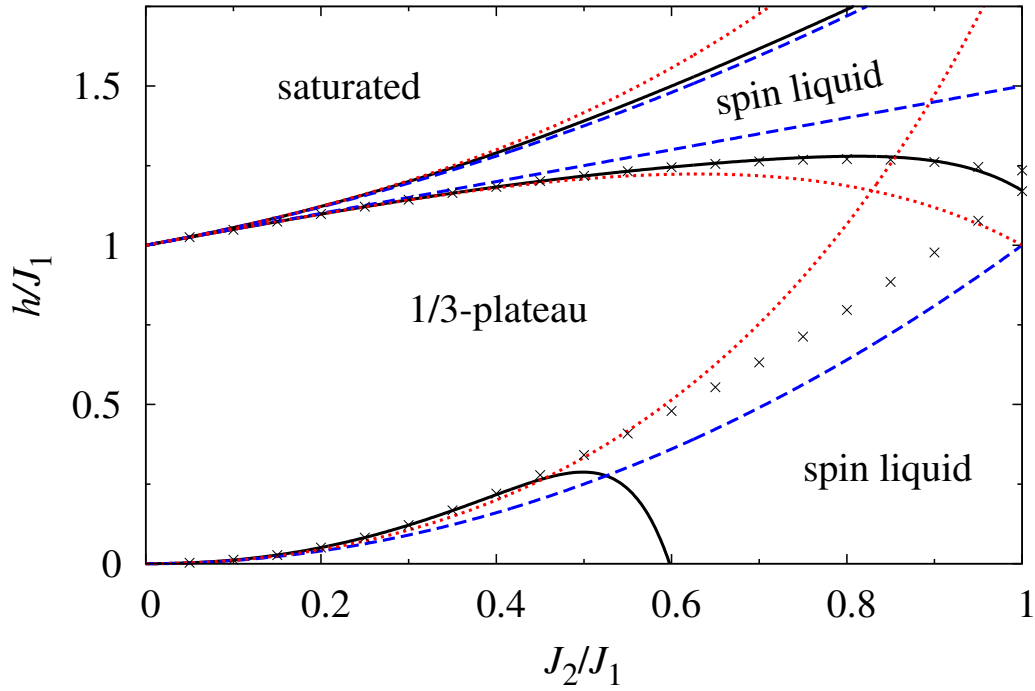


Рис. 6.14. Фазова діаграма основного стану спін-1/2 тримеризованого ланцюжка Гайзенберга. Суцільні лінії відповідають розкладам в ряди [354], пунктирні лінії показують підхід другого порядку сильного зв'язку [352, 355], пунктирні лінії відповідають теорії збурень другого порядку, розробленій на основі спін-1/2 ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга (6.63), тоді як символи представляють моделювання DMRG оригінального тримеризованого спінового ланцюжка Гайзенберга (6.56) із кількістю комірок $L = 28$. Крихітне плато 1/3 для моделювання DMRG при $J_2/J_1 = 1$ є результатом ефекту скінченного розміру, і воно, очевидно, зникає в термодинамічній границі.

$h_{1/3}^l$ фази плато 1/3, яке починає стрімко спадати у порівнянні з числовими даних DMRG вище $J_2/J_1 \gtrsim 0.5$. Теорія збурень другого порядку, розроблена на основі точно розв'язного ромбічного ланцюжка Ізинга-Гайзенберга, також дає досить точні результати для критичних полів у широкому діапазоні простору параметрів $J_2/J_1 \lesssim 0.6$. За винятком поля насичення, така теорія збурень забезпечує значно кращі результати для критичних полів порівняно з підходом сильного зв'язку, розробленим до другого порядку від границі невзаємодіючих мономерів і димерів [352, 355]. Цей простіший підхід сильного зв'язку дає для малих полів ефективний спін-1/2 ланцюжок Гайзенберга з ізотропною константою зв'язку $J_{eff} = \frac{J_2^2}{2J_1}$ (див. рівняння (5.6) у статті [352]), тоді як для достатньо високих полів отримують

ється ефективний спін-1/2 XX ланцюжок з константою взаємодії $J_{xy} = \frac{J_2^2}{4J_1}$ (див. рівняння (7)-(10) [355]). Тому особливо цікаво порівняти точність обох пертурбативних методів: вищезазначені результати збігаються з нашими результатами у другому порядку щодо коефіцієнта зв'язку J_2/J_1 . Що стосується вищих значень співвідношення взаємодії J_2/J_1 , плато 1/3 зникає в рамках представленої схеми теорії збурень при $J_2/J_1 \approx 0.8$, тоді як простіший метод сильного зв'язку зберігає це плато до $J_2/J_1 = 1$. Варто також зауважити, що ефективна модель (6.61) та відповідні критичні поля (6.63), отримані в режимі високого поля, збігаються з результатами підходу локалізованих магнонів при розгляді межі тримеризованого ланцюжка [356].

Магнітна сполука $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$, як експериментальна реалізація спін-1/2 тримеризованого ланцюжка Гайзенберга [113, 114], забезпечує відповідний тест для перевірки ефективності розробленої теорії збурень. Насамперед, підсумуємо основні результати, про які повідомлялося в експериментальних дослідженнях [113, 114, 178]. Вимірювання намагніченості показало наявність проміжного 1/3-плато, яке виникає на кривій намагніченості при низькій температурі у сильному полі вище 12 Т. Температурна залежність магнітної сприйнятливості демонструє округлий максимум із висотою піку $\chi_{\max} = 0.0154$, що виникає при $T_{\max} \approx 3.25$ К [113], тоді як гіромагнітний g -фактор був визначений вимірюванням ESR як $g = 2.12$ [113]. Чіткий непружний пік при $\omega = 9.8$ меВ = 113.7 К, який лише слабо залежить від хвильового вектора, було виявлений за допомогою непружного розсіяння нейтронів [114, 178].

Спочатку продемонструємо, як дані про сприйнятливість, виміряні в широкому діапазоні температур, можуть надати достатню інформацію для оцінки мікроскопічних параметрів моделі. Слід нагадати, що сприйнятливість спін-1/2 ланцюжка Гайзенберга з константою зв'язку J_{eff} має пік $\chi_{\max}^H \approx 0.147/J_{eff}$ при $k_B T_{\max}^H/J_{eff} \approx 0.640824$ [357]. Подібний висновок також був отриманий для максимуму питомої теплоємності: $C_{\max}^H \approx 0.35/J_{eff}$ при $k_B T_{\max}^c/J_{eff} \approx 0.481$ [358]. Оскільки спін-1/2 тримеризований ланцюжок Гайзенберга може бути точно пред-

ставлений за достатньо низьких температур ефективним ланцюжком Гайзенберга (6.59), ефективну взаємодію J_{eff} можна відразу знайти із положенням максимуму сприйнятливості, що спостерігається в експерименті:

$$J_{eff}/k_B \approx T_{max}/0.640824 = 5.071595321 \text{ К.} \quad (6.64)$$

Відповідно до рівняння (6.59), $J_{eff}/k_B \approx 5,071$ забезпечує корисне співвідношення між константами димерної J_1 і димер-мономерної J_2 взаємодій. Інше незалежне співвідношення, що об'єднує обидві константи зв'язку, можна отримати за високотемпературною поведінкою χT . При дуже високих температурах переважає парамагнітна поведінка, і, таким чином, добуток χT прямує до сталої Кюрі $C = \frac{Ng^2\mu_B^2 S(S+1)}{3k_B}$, де S — величина спіну. Однак значна обмінна взаємодія може мати помітний ефект навіть при відносно високих температурах $T \sim 200 - 300$ К, де χT , здається, ще далеко до насичення. Щоб отримати відповідний опис високотемпературної сприйнятливості, можна скористатися першим порядком групового розкладу для термодинамічної теорії збурень [28]:

$$\chi = \frac{g^2\mu_B^2\beta}{3} \left[\frac{1}{4} + \frac{2}{3 + \exp(\beta J_1)} - \frac{\beta J_2}{3 + \exp(\beta J_1)} \right], \quad (6.65)$$

Реалізація нелінійного алгоритму найменших квадратів Марквардта-Левенберга [359] для припасування даних сприйнятливості за формулою (6.65) з одночасним врахуванням рівнянь (6.59) та (6.64) дозволила знайти для магнітної сполуки $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$ такий набір мікроскопічних параметрів $g = 2.2$, $J_1/k_B = 102.67$ К, $J_2/k_B = 29.83$ К. Відповідно до цього набору, проміжне плато $1/3$ має з'явитися в діапазоні магнітного поля між 10.14 Т і 79 Т. Зауважимо, що раніше було запропоновано два різні набори констант зв'язку для магнітної сполуки $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$, а саме: $J_1/k_B = 98$ К, $J_2/k_B = 28$ К [113] і $J_1 = 111/k_B$ К, $J_2/k_B = 30$ К [114, 178].

Тримеризований і однорідний спін-1/2 ланцюжки Гайзенберга можна досліджувати квантовим методом Монте-Карло, і порівняти результати розрахунків низькотемпературної намагніченості та температурної залежності магнітної сприйнятливості з відповідними експериментальними даними, наведеними раніше для $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$ на рис. 6.15 і 6.16. З рис. 6.16 видно, що виміряні дані

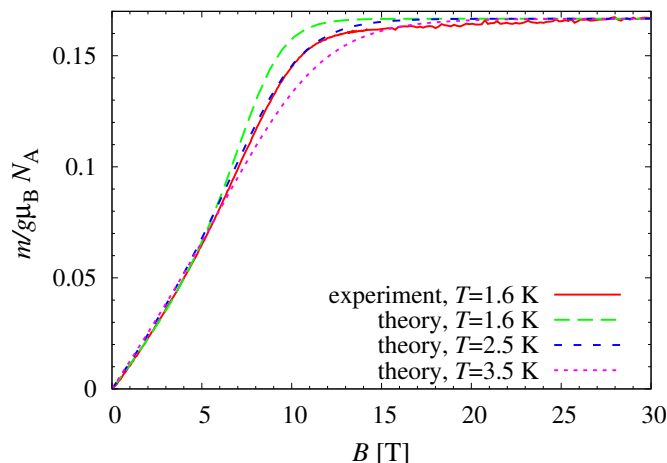


Рис. 6.15. Ізотермічна крива намагніченості $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$, поміряна при $T = 1.6$ К, і відповідний теоретичний прогноз, зроблений за допомогою моделювання QMC спінів-1/2 тримеризованого ланцюжка Гайзенберга з $L = 120$ спінами для відповідного набору параметрів: $J_1/k_B = 102.67$ К, $J_2/k_B = 29.83$ К, $g = 2.2$ (5×10^4 кроків QMC було використано для термалізації та додаткових 5×10^5 кроків QMC для статистичного усереднення.)

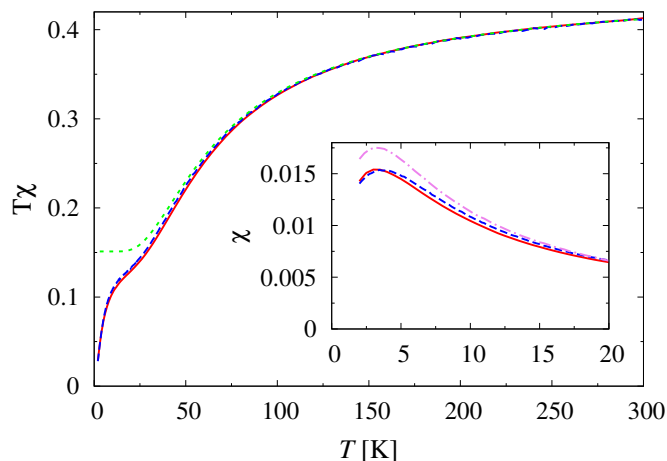


Рис. 6.16. Температурна залежність добутку сприйнятливості та температури для $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$. Експериментальні дані (суцільні лінії) порівнюються з теоретичними даними (штрихові лінії), які були отримані за допомогою QMC моделювання спінів- $\frac{1}{2}$ тримеризованого ланцюжка Гайзенберга з $L = 120$ спінами для параметрів: $J_1/k_B = 102.67$ К, $J_2/k_B = 29.83$ К, $g = 2.2$. Пунктирна лінія на головній панелі є результатом термодинамічної теорії збурень (6.65), тоді як пунктирно-пунктирна лінія на вставці відображає дані QMC для ефективної моделі (6.59).

для магнітної сприйнятливості і числові розрахунки близькі в усьому температурному діапазоні. З іншого боку, з рис. 6.15 випливає, що теоретичні результати для намагніченості добре збігаються з експериментальними даними лише для досить низьких магнітних полів, тоді як вони переоцінюють експериментальні дані для більших магнітних полів. Одним із вірогідних пояснень цієї невідповідності є адіабатичне нагрівання зразка під час процесу намагнічення, яке може бути підтверджено теоретичними даними намагніченості, розрахованими при трохи вищих температурах. Нарешті, варто зауважити, що ефективний спін-1/2 ланцюжок Гайзенберга (6.59) також передбачає низькотемпературний пік питомої теплоємності при $T \approx 2.44$ К, тоді як подібна особливість також експериментально спостерігалася [113].

6.3. Точні основні стани для моделі Ізинга-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда

Розглянемо спін-1/2 модель Ізинга-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда з димерною XXZ взаємодією Гайзенберга $J(\Delta)$ і міждиммерною взаємодією Ізинга J' , визначеною через такий гамільтоніан:

$$\begin{aligned}
 H = & J \sum_{i,j=1}^N (\mathbf{s}_{1,i,j} \cdot \mathbf{s}_{2,i,j})_{\Delta} + J' \sum_{i,j=1}^N (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z)(s_{1,i+1,j}^z + s_{2,i-1,j}^z) \\
 & + J' \sum_{i,j=1}^N (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z)(s_{1,i,j+1}^z + s_{2,i,j-1}^z), -h \sum_{i,j=1}^N (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) \quad (6.66)
 \end{aligned}$$

де $(\mathbf{s}_{1,i,j} \cdot \mathbf{s}_{2,i,j})_{\Delta} = \Delta(s_{1,i,j}^x s_{2,i,j}^x + s_{1,i,j}^y s_{2,i,j}^y) + s_{1,i,j}^z s_{2,i,j}^z$, $s_{l,i,j}^{\alpha}$ позначає проекції ($\alpha = x, y, z$) спін-1/2 оператора, перший індекс $l = 1, 2$ перераховує спіни всередині Гайзенберґового димера, другий і третій індекс визначає положення димера на фіктивній квадратній ґратці, вказуючи на його стовпець і рядок відповідно (див. рис. 6.17). Перше та друге підсумовування проведено по всіх димерах, щоб врахувати анізотропну XXZ димерну взаємодію Гайзенберга $J(\Delta)$ та магнітостатичну енергію спінів у зовнішньому магнітному полі h , тоді як третя (четверта) сума \sum'

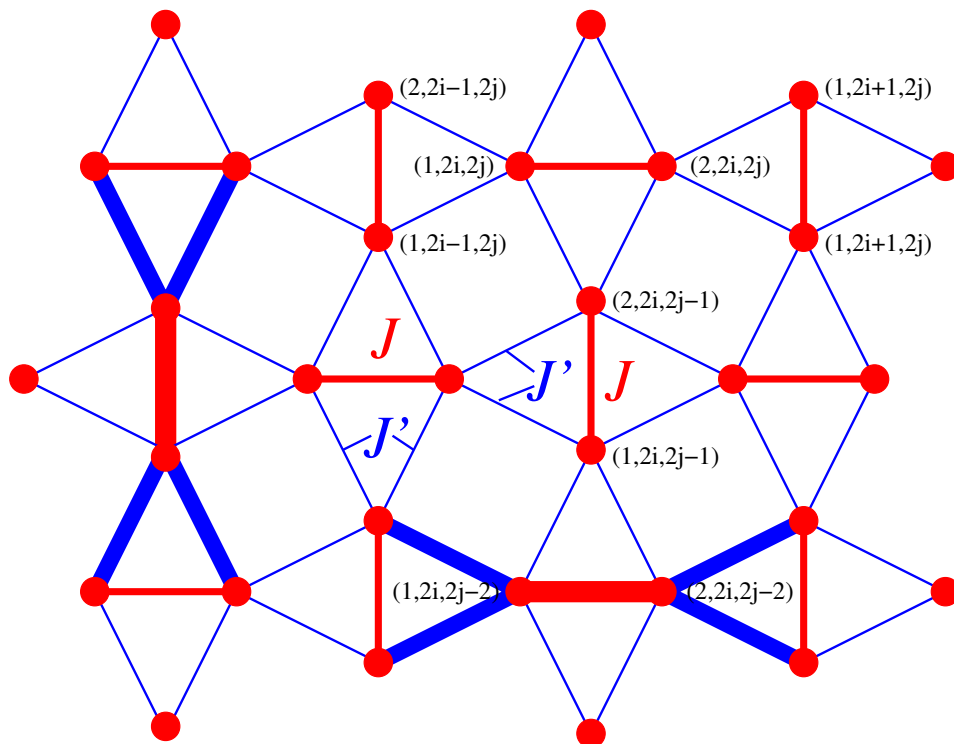


Рис. 6.17. Схематична ілюстрація моделі Ізинґа-Гайзенберґа зі спіном $1/2$ на ґратці Шастри-Сазерленда з внутрішньодимерною XXZ взаємодією Гайзенберґа $J(\Delta)$ і міждимерною взаємодією Ізинґа J' . Тонкі (сині) лінії показують зв'язок Ізинґа, а товсті (червоні) лінії позначають зв'язок Гайзенберґа. Спіни всередині димерів Гайзенберґа пронумеровані зліва направо та знизу вгору відповідно (див. також рис. 6.18).

(\sum'') обмежена умовою $i + j$ — непарне число ($i + j$ — парне число), поширюється на всі вертикальні (горизонтальні) димери з урахуванням для міждимерної взаємодії Ізинґа J' .

Модель, визначену гамільтоніаном (6.66), можна альтернативно розглядати як сукупність димерів Гайзенберґа зі спіном $1/2$ на фіктивній квадратній ґратці, що складається з двох взаємопроникаючих підґраток: одна підґратка горизонтальних димерів ($i + j$ парні) і один із вертикальних димерів ($i + j$ непарні). Спіни найближчих сусідів від димерів, що належать до різних підґраток, пов'язані взаємодією Ізинґа між димерами. Для додаткової зручності зручно переписати загальний гамільтоніан (6.66) як суму локальних кластерних гамільтоніанів:

$$H = \sum'_{i,j=1}^N H_{i,[j-1:j+1]} + \sum''_{i,j=1}^N H_{[i-1:i+1],j}, \quad (6.67)$$

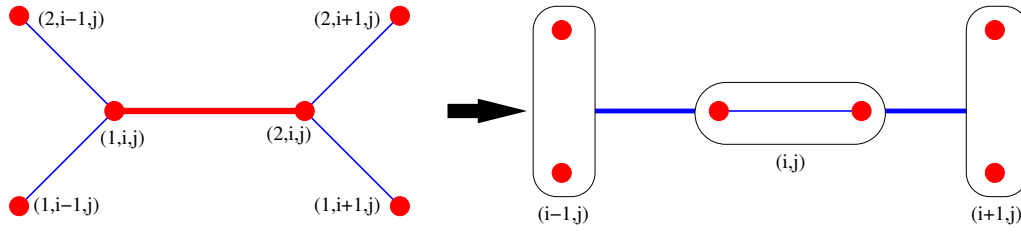


Рис. 6.18. Схематичне зображення локального кластерного гамільтоніана $H_{[i-1:i+1],j}$, утвореного трьома послідовними димерами в горизонтальному напрямку, і його зведення до Ізингової форми.

$$\begin{aligned}
 H_{[i-1:i+1],j} &= J(\mathbf{s}_{1,i,j} \cdot \mathbf{s}_{2,i,j})_{\Delta} + J'[(s_{1,i-1,j}^z + s_{2,i-1,j}^z)s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z(s_{1,i+1,j}^z + s_{2,i+1,j}^z)] - h(s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z), \\
 H_{i,[j-1:j+1]} &= J(\mathbf{s}_{1,i,j} \cdot \mathbf{s}_{2,i,j})_{\Delta} + J'[(s_{1,i,j-1}^z + s_{2,i,j-1}^z)s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z(s_{1,i,j+1}^z + s_{2,i,j+1}^z)] - h(s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z),
 \end{aligned} \tag{6.68}$$

які включають усі доданки взаємодії між найближчими спінами зі спінових кластерів, утворених трьома послідовними димерами, розташованими в горизонтальному або вертикальному напрямку (див. спіновий кластер ліворуч на рис. 6.18). Через специфіку форми гамільтоніана z -компонента повного спіну $S_{i,j}^z = s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z$ кожного димера Гайзенберга комутує із загальним гамільтоніаном (6.67), а також з кожним локальним кластерним гамільтоніаном (6.68). 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 (6.68) також комутують один з одним. Ця властивість має фундаментальне значення для зведення загального гамільтоніана (6.67) до діагонального представлення в термінах Ізингових спінів, яке може бути здійснено локальними унітарними перетвореннями. Варто зауважити, що локальні кластерні гамільтоніани (6.68) вже діагональні в окремому підпросторі $S_{i,j}^z = \pm 1$ димерів Гайзенберга з однаково орієнтованими спінами. Для діагоналізації локальних кластерних гамільтоніанів (6.68) в іншому підпросторі $S_{i,j}^z = 0$, охопленому двома протилежно орієнтованими спінами димерів Гайзенберга, можна використати

локальне унітарне перетворення, що діє нетривіально лише в цьому підпросторі:

$$U_{i,j} = \left(\frac{1}{2} + 2s_{1,i,j}^z s_{2,i,j}^z \right) + \exp [i2\alpha_{i,j} s_{1,i,j}^x s_{2,i,j}^y] \left(\frac{1}{2} - 2s_{1,i,j}^z s_{2,i,j}^z \right), \quad (6.69)$$

де параметри $\alpha_{i,j}$ задаються таким чином:

$$\begin{aligned} \cos \alpha_{i,j} &= \frac{J'(S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z)}{\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2 (S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z)^2}}, \\ \sin \alpha_{i,j} &= \frac{\Delta J}{\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2 (S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z)^2}}, \text{ для парних } (i+j), \\ \cos \alpha_{i,j} &= \frac{J'(S_{i,j+1}^z - S_{i,j-1}^z)}{\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2 (S_{i,j+1}^z - S_{i,j-1}^z)^2}}, \\ \sin \alpha_{i,j} &= \frac{\Delta J}{\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2 (S_{i,j+1}^z - S_{i,j-1}^z)^2}}, \text{ для непарних } (i+j). \end{aligned} \quad (6.70)$$

З рівняння (6.70) цілком очевидно, що параметр перетворення $\alpha_{i,j}$ для горизонтальних (вертикальних) димерів Гайзенберга залежить від z -компоненти повного спіну на двох суміжних вертикальних (горизонтальних) димерах Гайзенберга. Застосовуючи унітарне перетворення (6.69) до локального кластерного гамільтоніана (6.68), можна отримати наступне діагональне (Ізингове) представлення локальних кластерних гамільтоніанів:

$$\begin{aligned} U_{i,j} H_{[i-1:i+1],j} U_{i,j}^+ &= \frac{|\Delta J|}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) + J s_{1,i,j}^z s_{2,i,j}^z - h (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) \\ &\quad + \frac{1}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) I(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z|) + \frac{J'}{2} (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) (S_{i+1,j}^z + S_{i-1,j}^z), \\ U_{i,j} H_{i,[j-1:j+1]} U_{i,j}^+ &= \frac{|\Delta J|}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) + J s_{1,i,j}^z s_{2,i,j}^z - h (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) \\ &\quad + \frac{1}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) I(|S_{i,j+1}^z - S_{i,j-1}^z|) + \frac{J'}{2} (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) (S_{i,j+1}^z + S_{i,j-1}^z), \end{aligned} \quad (6.71)$$

де

$$\begin{aligned} I(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z|) &= \delta(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z| - 1) \left(\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2} - |\Delta J| \right) \\ &\quad + \delta(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z| - 2) \left(\sqrt{\Delta^2 J^2 + 4J'^2} - |\Delta J| \right) \geq 0, \quad (6.72) \\ \delta(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z| - 1) &= [(S_{i+1,j}^z)^2 - (S_{i-1,j}^z)^2]^2, \end{aligned}$$

$$\delta(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z| - 2) = \frac{1}{2} S_{i-1,j}^z S_{i+1,j}^z (S_{i-1,j}^z S_{i+1,j}^z - 1). \quad (6.73)$$

Тут символ $\delta(\dots)$ використовується для дельта-функції Кронекера. З рівняння (6.71) можна легко зрозуміти, що поперечна XX частина димерного зв'язку Гайзенберга створює через локальне унітарне перетворення (6.69) ефективне поле величини $\Delta J/2$ і складну ефективну мультиспінову взаємодію, конкретна форма якої в основному залежить від різниці між z -компонентами повного спіну на двох сусідніх димерах Гайзенберга. Графічне зображення унітарного перетворення (6.69) зображено на рис. 6.18. Інші важливі наслідки випливають із співвідношення комутації $[U_{i,j}, H_{[i'-1:i'+1],j'}] = [U_{i,j}, H_{i,[j'-1:j'+1]}] = 0$ для $i \neq i'$ або $j \neq j'$. Завдяки цьому факту можна окремо застосувати унітарне перетворення (6.69) до кожного димера Гайзенберга і, отже, весь гамільтоніан (6.67) зводиться до Ізинґового (діагонального) представлення:

$$\tilde{H} = \sum_{i,j=1}^N \tilde{H}_{i,j}^0 + \sum_{i,j=1}^N \tilde{V}_{i,[j-1:j+1]} + \sum_{i,j=1}^N \tilde{V}_{[i-1:i+1],j}, \quad (6.74)$$

де

$$\begin{aligned} \tilde{H}_{i,j}^0 &= \frac{|\Delta J|}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) + J s_{1,i,j}^z s_{2,i,j}^z - h (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z), \\ \tilde{V}_{[i-1:i+1],j} &= \frac{1}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) I (|s_{1,i+1,j}^z + s_{2,i+1,j}^z - s_{1,i-1,j}^z - s_{2,i-1,j}^z|) \\ &\quad + \frac{J'}{2} (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) (s_{1,i+1,j}^z + s_{2,i+1,j}^z + s_{1,i-1,j}^z + s_{2,i-1,j}^z) \\ \tilde{V}_{i,[j-1:j+1]} &= \frac{1}{2} (s_{2,i,j}^z - s_{1,i,j}^z) I (|s_{1,i,j+1}^z + s_{2,i,j+1}^z - s_{1,i,j-1}^z - s_{2,i,j-1}^z|) \\ &\quad + \frac{J'}{2} (s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z) (s_{1,i,j+1}^z + s_{2,i,j+1}^z + s_{1,i,j-1}^z + s_{2,i,j-1}^z). \end{aligned} \quad (6.75)$$

Схематичне зображення класичної спінової моделі, визначеної ефективним гамільтоніаном (6.74), представлено на рис. 6.19.

Далі розглядатиметься лише окремий випадок антиферромагнітної взаємодії $J > 0$ та $J' \geq 0$. z -компоненту Гайзенберґової XXZ взаємодії всередині димера використовуватимемо як одиницю енергії, поклавши $J = 1$. Спершу, можна легко перевірити, що діагональна форма локального кластерного гамільтоніана

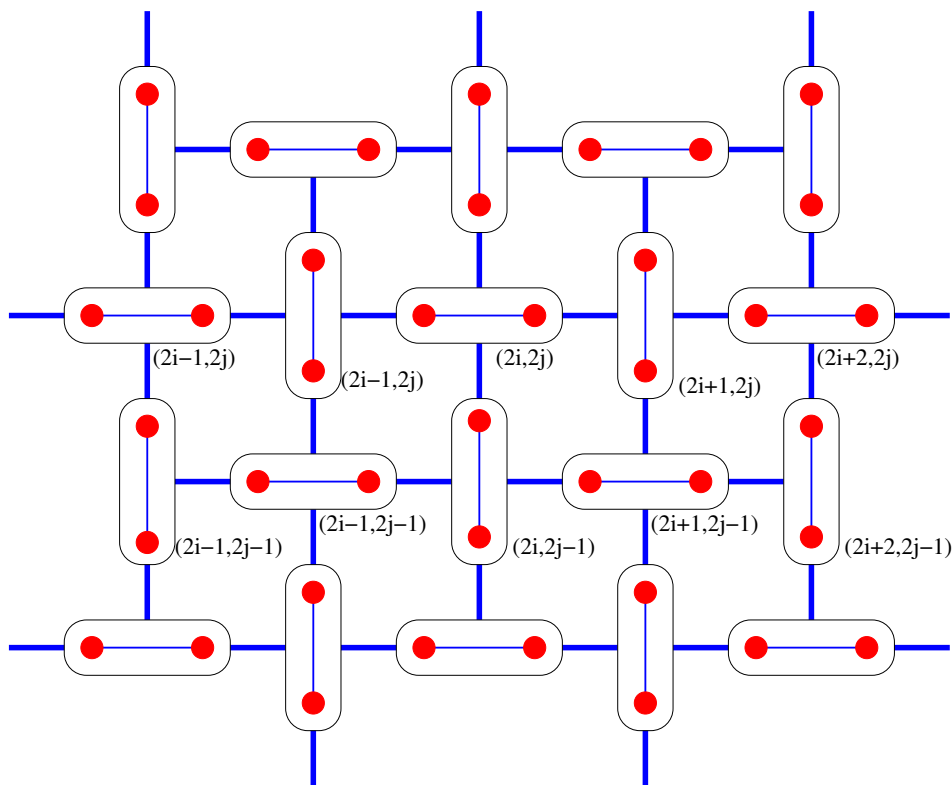


Рис. 6.19. Схематичне зображення ефективної класичної спінової моделі на ґратці Шастри-Сазерленда, отриманої шляхом застосування локального унітарного перетворення (6.69) до кожного димера Гайзенберга.

(6.71) завжди має меншу енергію для спінової конфігурації $s_{1,i,j}^z = \frac{1}{2}$, $s_{2,i,j}^z = -\frac{1}{2}$, ніж для оберненої спінової конфігурації $s_{1,i,j}^z = -\frac{1}{2}$, $s_{2,i,j}^z = \frac{1}{2}$ за умови анізотропії $\Delta > 0$. Звідси випливає, що останній антиферромагнітний стан можна повністю виключити з подальших розглядів для пошуку власних станів із найнижчою енергією спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда, але ним не можна знехтувати в спеціальній границі моделі Ізинґа $\Delta = 0$. Щоб знайти всі можливі основні стани моделі Ізинґа-Гайзенберга з $\Delta > 0$, достатньо розглянути всі спінові конфігурації, доступні повністю з трьох станів діагоналізованих локальних кластерних гамільтоніанів: $s_{1,i,j}^z = s_{2,i,j}^z = \frac{1}{2}$, $s_{1,i,j}^z = -s_{2,i,j}^z = \frac{1}{2}$ і $s_{1,i,j}^z = s_{2,i,j}^z = -\frac{1}{2}$, які можна альтернативно визначити як фіктивні спінові стани $S_{i,j}^z = +1, 0, -1$ деякої класичної ефективної моделі зі спіном 1. Діагональну форму гамільтоніана (6.74)-(6.75) можна зобразити у такому вигляді:

$$\tilde{H} = \sum_{i,j=1}^N \tilde{H}_{i,j}^0 + \sum_{i,j=1}^N \tilde{V}_{i,[j-1:j+1]} + \sum_{i,j=1}^N \tilde{V}_{[i-1:i+1],j},$$

$$\begin{aligned}
\tilde{H}_{i,j}^0 &= -\frac{1+\Delta}{2}J[1 - (S_{i,j}^z)^2] + \frac{J}{4} - hS_{i,j}^z, \\
\tilde{V}_{[i-1:i+1],j} &= -\frac{1}{2}[1 - (S_{i,j}^z)^2]I(|S_{i+1,j}^z - S_{i-1,j}^z|), \\
\tilde{V}_{i,[j-1:j+1]} &= -\frac{1}{2}[1 - (S_{i,j}^z)^2]I(|S_{i,j+1}^z - S_{i,j-1}^z|) + \frac{J'}{2}S_{i,j}^z(S_{i,j+1}^z + S_{i,j-1}^z). \quad (6.76)
\end{aligned}$$

Слід зазначити, що аналогічне представлення зі спіном 1 також справедливе для окремого випадку з $\Delta = 0$, що відповідає суто класичній моделі Ізинґа зі спіном 1/2 на ґратці Шастри-Сазерленда. На відміну від попереднього випадку, у граничному випадку Ізинґа $\Delta = 0$ ефективне поле $\Delta J/2$ повністю дорівнює нулю і, отже, два антиферромагнітних стани $s_{1,i,j}^z = -s_{2,i,j}^z = \pm\frac{1}{2}$ можуть мати однакові енергії, якщо тільки ефективна взаємодія між трьома послідовними димерами не призводить до нижчої енергії антиферромагнітного стану $s_{1,i,j}^z = -s_{2,i,j}^z = \frac{1}{2}$. Таким чином, двократне виродження антиферромагнітних станів $s_{1,i,j}^z = -s_{2,i,j}^z = \pm\frac{1}{2}$ на всіх димерах призводить до макроскопічно виродженого основного стану для моделі Ізинґа на ґратці Шастри-Сазерленда на відміну від моделі Ізинґа-Гайзенберґа із $\Delta > 0$.

Мінімізуючи ефективний гамільтоніан (6.76), ми виявили шість різних основних станів (див. рис. 6.20 для схематичної ілюстрації окремих основних станів):

- невироджена синглет-димерна (SD) фаза, утворена прямим добутком синглетних станів на Гайзенберґових димерах (див. рис. 6.20(a), (b)):

$$|\text{SD}\rangle = \prod_{i,j}^N |\tilde{0}_{i,j}\rangle = \prod_{i,j}^N |\mathcal{S}_{i,j}\rangle, \quad (6.77)$$

$$|\mathcal{S}_{i,j}\rangle = \frac{1}{2}(|\uparrow_{1,i,j}\downarrow_{2,i,j}\rangle - |\downarrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle). \quad (6.78)$$

- фаза сильно вироджених Ізинґових димерів (ID), утворена прямим добутком подвійно вироджених антиферромагнітних станів $|\uparrow_{1,i,j}\downarrow_{2,i,j}\rangle$ і $|\downarrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle$ на всіх димерах. Цей основний стан має високу макроскопічне виродження, пропорційне загальній кількості димерів 2^{N^2} , і він існує лише в Ізинґовії

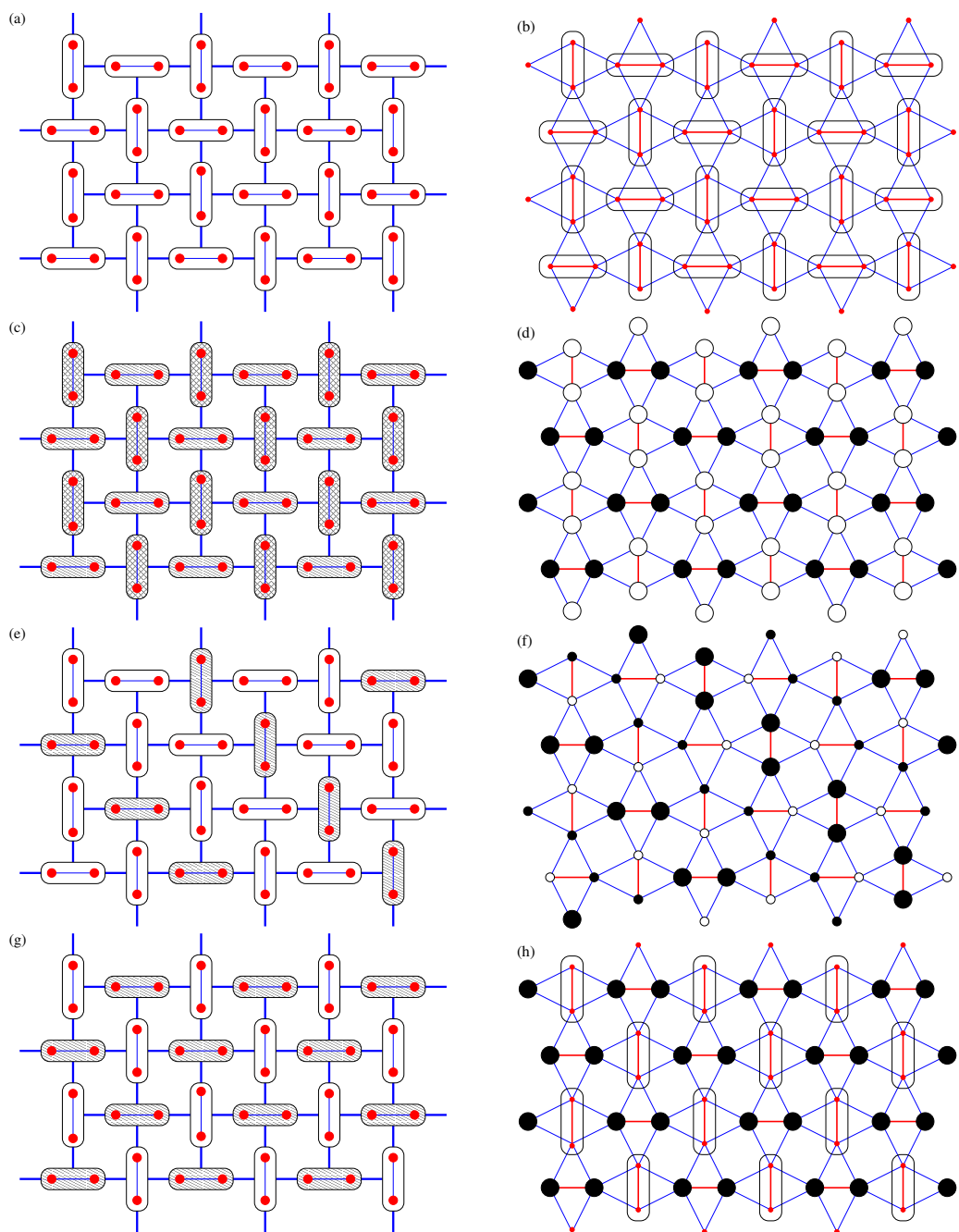


Рис. 6.20. Точні основні стани моделі (6.66). На лівій і правій панелях показано розташування спінів, які стосуються ефективного гамільтоніану (6.76) і вихідної моделі (6.66), відповідно. Рядки зверху вниз відповідають синглет-димерній фазі, антиферромагнітній фазі, стрічковій фазі та фазі шахового впорядкування. Заштриховані (прозорі) димери на лівій панелі позначають поляризовані триплетні (синглетні) стани. На правій панелі овал позначає стан синглетного димера, зафарбовані кола позначають спіни, орієнтовані в напрямку зовнішнього магнітного поля, порожні кола позначають спіни, орієнтовані проти зовнішнього магнітного поля, тоді як зменшений діаметр обох типів кіл відповідає квантовому зменшенню локальної намагніченості (6.82).

границі $\Delta = 0$.

- антиферромагнітна (AF) фаза, утворена прямим добутком двох типів поляризованих триплетних станів $S_{i,j}^z = \pm 1$ димерів, які регулярно чергуються таким чином, що кожен димер поляризований у протилежному напрямку по відношенню до всіх його найближчих сусідніх димерів (див. рис. 6.20(c), (d)):

$$\begin{aligned} |\text{AF}\rangle &= \left[\prod'_{i,j=1}^N |\tilde{\downarrow}_{i,j}\rangle \right] \left[\prod''_{i,j=1}^N |\tilde{\uparrow}_{i,j}\rangle \right] \\ &= \left[\prod'_{i,j=1}^N |\downarrow_{1,i,j}\downarrow_{2,i,j}\rangle \right] \left[\prod''_{i,j=1}^N |\uparrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle \right]. \end{aligned} \quad (6.79)$$

У цих виразах символи \prod' і \prod'' позначають добутки за всіма вертикальними димерами (непарні $(i+j)$) і всіма горизонтальними димерами (парні $(i+j)$) відповідно. Основний стан AF є подвійно виродженим, оскільки інший стан може бути створений з власного стану (6.79) шляхом взаємозаміни станів горизонтальних та вертикальних димерів.

- стрічкова фаза (плато $1/3$), в якій кожна діагональна стрічка поляризованих димерів регулярно чергується з двома стрічками димерів у синглетному (немагнітному) стані (див. рис. 6.20(e), (f)):

$$\begin{aligned} |m = 1/3\rangle &= \left[\prod'_{i,j=1}^N |\tilde{\uparrow}_{i,j}\rangle \right] \left[\prod''_{i,j=1}^N |\tilde{0}_{i,j}\rangle \right] \left[\prod'''_{i,j=1}^N |\tilde{0}_{i,j}\rangle \right] \\ &= \left[\prod'_{i,j=1}^N |\uparrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle \right] \left[\prod''_{i,j=1}^N |\phi_{i,j}^{(-)}\rangle \right] \left[\prod'''_{i,j=1}^N |\phi_{i,j}^{(+)}\rangle \right], \end{aligned} \quad (6.80)$$

$$|\phi_{i,j}^{(\pm)}\rangle = \cos \frac{\alpha^{(\pm)}}{2} |\downarrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle - \sin \frac{\alpha^{(\pm)}}{2} |\uparrow_{1,i,j}\downarrow_{2,i,j}\rangle. \quad (6.81)$$

Тут символи \prod' , \prod'' , \prod''' позначають добутки за індексами $i+j = 3L+1, 3L+2, 3L$ або $i-j = 3L+1, 3L+2, 3L$ (L — будь-яке ціле чи-

сло), кут змішування $\alpha^{(\pm)}$ у спін-синглетних станах $|\phi_{i,j}^{(\pm)}\rangle$ визначається як $\alpha^{(\pm)} = \arctan(\pm\Delta J/J')$ з $\alpha \in [0, \pi]$. Спінові квазісинглетні стани фіксують квантовий антиферромагнітний порядок на димерах Гайзенберга, який можна охарактеризувати ненульовою (але не повністю насиченою) шаховою намагніченістю, пов'язаною з квантовим зменшенням локальних намагніченостей залежно від взаємної конкуренції між Ізинговою міждиммерною взаємодією та поперечною XX частиною диммерної взаємодії Гайзенберга

$$\langle s_{1,i,j}^z \rangle_{\phi^{(\pm)}} = -\langle s_{2,i,j}^z \rangle_{\phi^{(\pm)}} = \pm \frac{1}{2} \frac{J'}{\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2}}, \quad (6.82)$$

де $\langle \dots \rangle_{\phi^{(\pm)}} = \langle \phi_{i,j}^{(\pm)} | \dots | \phi_{i,j}^{(\pm)} \rangle$. Цей основний стан є шестикратно виродженим, оскільки інші п'ять станів можуть бути створені з власного стану (6.80) трансляцією та/або відображенням.

- фаза шахового впорядкування (плато $1/2$), в якій синглетний стан на вертикальних димерах регулярно чергується з поляризованим станом на горизонтальних димерах або навпаки (див. рис. 6.20(g), (h)) :

$$\begin{aligned} |m = 1/2\rangle &= \left[\prod_{i,j=1}^N |\tilde{0}_{i,j}\rangle \right] \left[\prod_{i,j=1}^N |\tilde{\uparrow}_{i,j}\rangle \right] \\ &= \left[\prod_{i,j=1}^N |\mathcal{S}_{i,j}\rangle \right] \left[\prod_{i,j=1}^N |\uparrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle \right]. \end{aligned} \quad (6.83)$$

Тут символи \prod' і \prod'' позначають добутки по всіх вертикальних димерах і всіх горизонтальних димерах, відповідно. Цей основний стан є подвійно виродженим через можливу взаємозаміну станів на вертикальних і горизонтальних димерах.

- насичена парамагнітна фаза з повністю поляризованими димерами:

$$|m = 1\rangle = \prod_{i,j=1}^N |\tilde{\uparrow}_{i,j}\rangle = \prod_{i,j=1}^N |\uparrow_{1,i,j}\uparrow_{2,i,j}\rangle. \quad (6.84)$$

На цьому етапі ми можемо адаптувати процедуру, розроблену в роботах [210, 360] для спін- $1/2$ моделі Ізинга на ґратці Шастри-Сазерленда, щоб з'ясувати,

чи деякі з точних власних станів (6.77)–(6.84) представляють справжній основний стан у певному діапазоні параметрів. Для цього зручно спочатку переписати загальну конфігураційну енергію як суму енергій локальних кластерних гамільтоніанів, які залежать виключно від z -компоненти повного спіну на всіх димерах:

$$\begin{aligned}
H'_{[i-1:i+1],j}(S_{i-1,j}^z, S_{i,j}^z, S_{i+1,j}^z) &= \tilde{V}_{[i-1:i+1],j} - \frac{h}{4}(S_{i-1,j}^z + 2S_{i,j}^z + S_{i+1,j}^z) - \frac{(1+2\Delta)J}{4} \\
&\quad + \frac{(1+\Delta)J}{2} \left\{ \gamma [(S_{i-1,j}^z)^2 + (S_{i+1,j}^z)^2] + (1-2\gamma)(S_{i,j}^z)^2 \right\}, \\
H'_{i,[j-1:j+1]}(S_{i,j-1}^z, S_{i,j}^z, S_{i,j+1}^z) &= \tilde{V}_{i,[j-1:j+1]} - \frac{h}{4}(S_{i,j-1}^z + 2S_{i,j}^z + S_{i,j+1}^z) - \frac{(1+2\Delta)J}{4} \\
&\quad + \frac{(1+\Delta)J}{2} \left\{ \gamma [(S_{i,j-1}^z)^2 + (S_{i,j+1}^z)^2] + (1-2\gamma)(S_{i,j}^z)^2 \right\} \quad (6.85)
\end{aligned}$$

і, які містять новий вільний параметр γ , що буде визначено пізніше. Введемо також спрощене позначення $E(S_1^z, S_2^z, S_3^z)$ для конфігураційної енергії локального кластерного гамільтоніана (6.85), що включає три послідовні димери або в горизонтальному, або у вертикальному напрямку. Таким чином, повна енергія моделі є сумою конфігураційних енергій $E(S_1^z, S_2^z, S_3^z)$ усіх кластерів (6.85). Щоб отримати основний стан, ми повинні знайти конфігурації кластера (S_1^z, S_2^z, S_3^z) , які досягають найменшої енергії, і зібрати з них стан усієї системи. Усі створені таким чином стани відповідають основному стану ефективної класичної спінової моделі. Нарешті, зворотні перетворення $U_{i,j}^+$ застосовуються для відновлення основного стану початкової моделі Ізинґа-Гайзенберґа (6.66).

За відсутності зовнішнього магнітного поля $h = 0$ ми можемо вибрати параметр $\gamma = 1/2$, щоб задовольнити умову найменшої конфігураційної енергії $E(0, 0, 0)$ для $J' < (1 + \Delta)J/2$, інакше конфігураційні енергії $E(1, -1, 1) = E(-1, 1, -1)$ досягають найменшого значення. У цьому відношенні фаза синглетних димерів становить основний стан нульового поля для $J' < (1 + \Delta)J/2$, оскільки вона повністю складається з кластерів з найнижчою енергією з конфігурацією $(0, 0, 0)$. Навпаки, кластери з найнижчою енергією з конфігураціями $(1, -1, 1)$ і $(-1, 1, -1)$ можуть регулярно чергуватися, щоб створити інший основний антиферромагнітний стан нульового поля, якщо виконується протилежна умова $J' > (1 + \Delta)J/2$.

Ситуація стає дещо складнішою в ненульовому магнітному полі. З рис. 6.20(e),(f) видно, що стрічкова фаза може бути складена з кластерів $(0,1,0)$ та $(1,0,0)$, кожен з яких містить лише один поляризований димер із трьох послідовних димерів у центральному чи бічному положенні. Таким чином, необхідно переконатися, що енергії таких кластерів можуть стати рівними одна одній, і що вони одночасно є найменшими в певній області параметрів, щоб перевірити, чи може стрічкова фаза стати основним станом. Тому відповідне значення параметра γ потрібно шукати з умови $E(0, 1, 0) = E(1, 0, 0)$:

$$\gamma = \frac{2}{3(1 + \Delta)J} \left(-\frac{h}{4} + \frac{J}{2} + \frac{1}{2}\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2} \right). \quad (6.86)$$

Обчислення цього конкретного значення (6.86) доводить, що конфігураційні енергії задовольняють нерівність $E(0, 0, 0) < E(0, 1, 0) = E(1, 0, 0)$ для $J' < (1 + \Delta)J/2$, якщо магнітне поле менше першого критичного значення ($h < h_1$)

$$h_1 = \frac{(1 + 3\Delta)J}{2} - \sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2}, \quad (6.87)$$

тоді як конфігураційні енергії задовольняють нерівності $E(1, -1, 1) = E(-1, 1, -1) < E(0, 1, 0) = E(1, 0, 0)$ для $J' > J(1 + \Delta)/2$, якщо магнітне поле нижче другого критичного значення ($h < h_2$)

$$h_2 = 3J' - J - \sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2}. \quad (6.88)$$

Слід зазначити, що енергії всіх інших конфігурацій, не згаданих у нерівностях вище і нижче, мають ще вищі значення для розглянутих полів і взаємодій, а отже, не є суттєві. Ці результати свідчать про те, що стрічкова фаза є енергетично вигіднішою по відношенню до синглет-димерної та антиферромагнітної фаз для магнітних полів $h > h_1$, якщо $J' < (1 + \Delta)J/2$ і $h > h_2$, якщо $J' > (1 + \Delta)J/2$ відповідно. Крім того, конфігураційні енергії, що стосуються стрічкової фази, виконують умову $E(0, 1, 0) = E(1, 0, 0) < E(1, 0, 1)$, доки магнітне поле не перевищує третього критичного значення ($h < h_3$)

$$h_3 = \frac{(1 - 3\Delta)J}{2} + 2\sqrt{\Delta^2 J^2 + J'^2}, \quad (6.89)$$

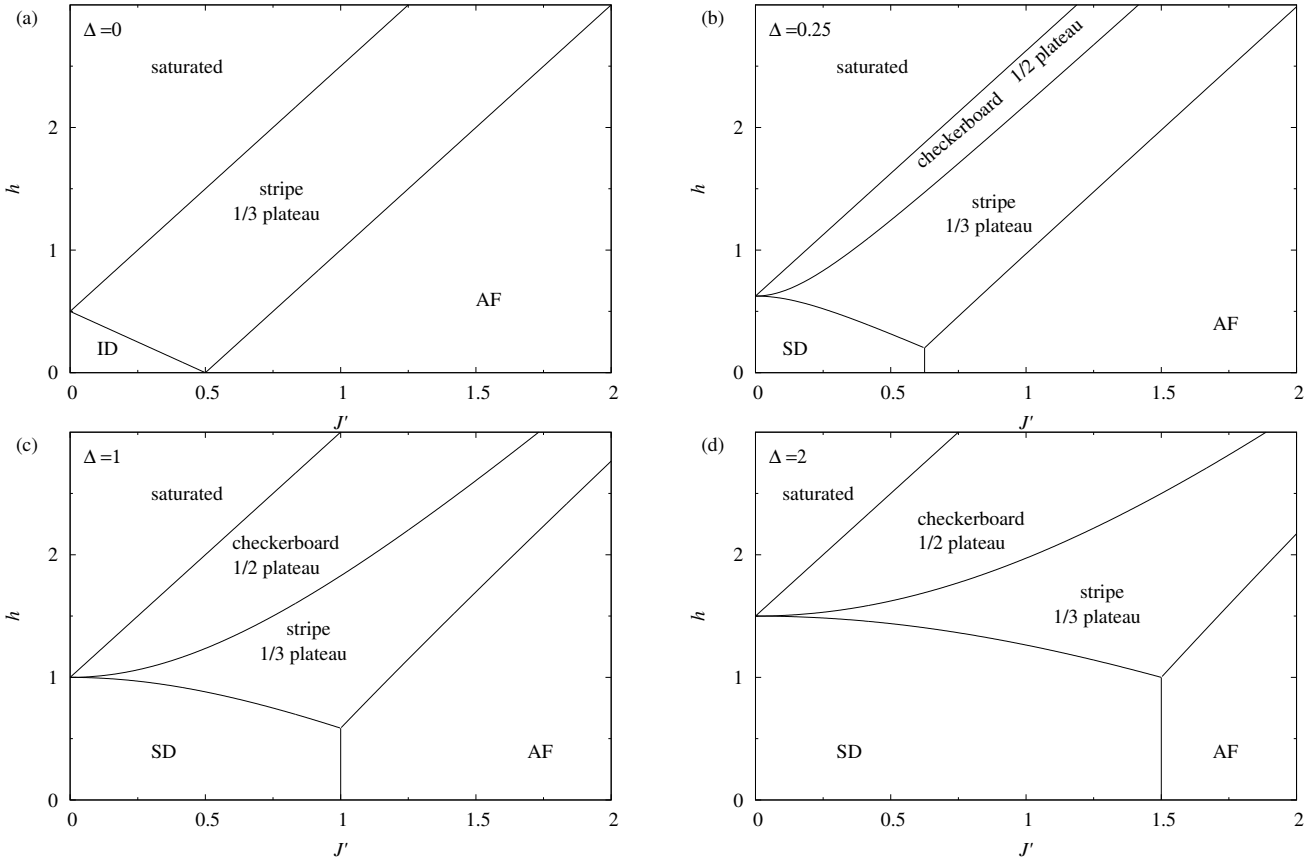


Рис. 6.21. Фазова діаграма основного стану моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда в площині $J' - h$ для кількох значень обмінної анізотропії: (a) $\Delta = 0.0$, (b) $\Delta = 0.25$, (c) $\Delta = 1.0$, (d) $\Delta = 2.0$.

вище якого в основному стані розвивається фаза шахового впорядкування димерів за рахунок регулярного чергування кластерів $(1,0,1)$ і $(0,1,0)$. Спеціальне значення параметра $\gamma = 1/4$ можна використати для отримання нижньої та верхньої границь фази шахового впорядкування, визначеної умовами $E(1, 0, 0) < E(0, 1, 0) = E(1, 0, 1) < E(1, 1, 1)$. Ліва нерівність справедлива для $h > h_3$, тоді як права виконується, якщо магнітне поле менше четвертого критичного поля

$$h_4 = 2J' + \frac{(1 + \Delta)J}{2}. \quad (6.90)$$

З вищезгаданих аргументів цілком очевидно, що особливе значення магнітного поля h_4 відповідає полю насичення, вище якого досліджувана система переходить у насичену парамагнітну фазу з повністю поляризованими димерами в напрямку зовнішнього магнітного поля.

Завершимо обговорення основного стану моделі Ізинга-Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда такими висновками. Основний стан у нульовому полі утворюється або синглет-димерною фазою для слабших Ізингових міждимерних зв'язків $J' < (1 + \Delta)J/2$, або класичною антиферомагнітною фазою для сильніших $J' > (1 + \Delta)J/2$. Синглет-димерна фаза залишається основним станом при досить малих магнітних полях $h < h_1$, коли $J' < (1 + \Delta)J/2$, і аналогічно антиферомагнітна фаза утворює основний стан при малих достатньо магнітних полів $h < h_2$, коли $J' > (1 + \Delta)J/2$. Синглет-димерна та антиферомагнітна фази замінюються стрічковою фазою, яка стає основним станом для проміжних магнітних полів $h_3 > h > h_1$ за умови $J' < (1 + \Delta)J/2$ і, відповідно, $h_3 > h > h_2$, якщо $J' > (1 + \Delta)J/2$. Для магнітних полів $h > h_3$ фаза шахового порядку є енергетично вигіднішою, аніж стрічкова фаза, і цей основний стан зберігається до поля насичення $h < h_4$. За достатньо сильного магнітного поля $h > h_4$ система потрапляє в насичену парамагнітну фазу з повністю поляризованими димерами вздовж зовнішнього магнітного поля.

6.4. Теорія збурень за квантовою частиною міждимерної взаємодії для моделі Шастри-Сазерленда

Розгляньмо тепер складніший випадок спін-1/2 моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда [122] у зовнішньому магнітному полі, визначеному таким гамільтоніаном:

$$H = J \sum_{\langle l, m \rangle} \mathbf{s}_l \cdot \mathbf{s}_m + J' \sum_{\langle\langle l, m \rangle\rangle} \mathbf{s}_l \cdot \mathbf{s}_m - h \sum_l s_l^z, \quad (6.91)$$

де $\langle l, m \rangle$ і $\langle\langle l, m \rangle\rangle$ позначають підсумовування всіх димерних J і міждимерних J' взаємодій, загальний індекс вузла $l = (n, i, j)$ включає номер $n = 1$ або 2 спіну в димері на додаток до двох наступних номерів i і j , що визначають положення димера в стовпці та рядку ґратки Шастри-Сазерленда відповідно (див. рис. 6.17 для нумерації вузлів). Нарешті, параметр $h = g\mu_B H$ позначає стандартний член

Зеємана, μ_B — магнетон Бора, g — гіромагнітний фактор магнітних іонів, H — зовнішнє магнітне поле.

Звичайна процедура пертурбативного підходу, який виходить з границі не-заємодіючих димерів, повільно збігається і вимагає членів розкладу вищого порядку. Наприклад, розклад до третього порядку здатний відтворити лише 1/2 та 1/3 плато моделі Шастри-Сазерленда [135]. Як зазначено вище тут ми розвинемо покращений варіант теорії збурень на основі точного розв'язку для основного стану моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда з димерною Гайзенберґовою та міждимерною Ізинґовою взаємодіями, заданим гамільтоніаном (6.66) записаної у компактній формі:

$$H_{IH} = J \sum_{\langle l,m \rangle} \mathbf{s}_l \cdot \mathbf{s}_m + J' \sum_{\langle\langle l,m \rangle\rangle} s_l^z s_m^z - h \sum_l s_l^z. \quad (6.92)$$

Оскільки вважаємо димерну взаємодію набагато сильнішою за міждимерну, тобто $J > J'$, зручно використовувати базис димерних станів для пари спінів, пов'язаних сильнішою димерною взаємодією:

$$\begin{aligned} |0\rangle_{i,j} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{1,i,j} |\downarrow\rangle_{2,i,j} - |\downarrow\rangle_{1,i,j} |\uparrow\rangle_{2,i,j}), \\ |1\rangle_{i,j} &= |\uparrow\rangle_{1,i,j} |\uparrow\rangle_{2,i,j}, \\ |2\rangle_{i,j} &= \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\rangle_{1,i,j} |\downarrow\rangle_{2,i,j} + |\downarrow\rangle_{1,i,j} |\uparrow\rangle_{2,i,j}), \\ |3\rangle_{i,j} &= |\downarrow\rangle_{1,i,j} |\downarrow\rangle_{2,i,j}, \end{aligned} \quad (6.93)$$

де $|0\rangle_{i,j}$ позначає синглетний стан димера, а $|1\rangle_{i,j}$, $|2\rangle_{i,j}$, $|3\rangle_{i,j}$ відповідають триплетному стану димера з такими значеннями z -компоненти повного спіну $S_{i,j}^z = s_{1,i,j}^z + s_{2,i,j}^z = 1, 0, -1$ відповідно. Таке представлення забезпечує простий опис усіх основних станів, які виникають у спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда, заданій гамільтоніаном (6.92). Як показано в попередньому підрозділі 6.3, гамільтоніан H_{IH} можна привести до діагональної форми за допомогою унітарного перетворення (6.69), і основний стан моделі для $J' \leq J$ можна схарактеризувати наступними чотирма фазами: синглет-димерна фаза для $h < h_{c1}$, стрічкова фаза (див. рис. 6.22) для $h_{c1} < h < h_{c2}$, шахової 1/2-плато фази

для $h_{c2} < h < h_{c3}$ і насиченої парамагнітної фази для $h > h_{c3}$. Критичні поля, що визначають відповідні фазові межі основного стану, явно задаються таким чином:

$$\begin{aligned} h_{c1} &= 2J - \sqrt{J^2 + J'^2}, \\ h_{c2} &= -J + 2\sqrt{J^2 + J'^2}, \\ h_{c3} &= J + 2J'. \end{aligned} \quad (6.94)$$

Слід зазначити, що основний стан моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда макроскопічно вироджений при першому критичному полі h_{c1} , і множини його конфігурацій можна розглядати як газ $S^z = 1$ триплетних збуджень, які називають триплонами [361], що виникають на фоні кристала синглетних димерів. Вище було показано (див. підрозділ 6.3), що основні стани спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда можуть бути побудовані з шестиспінового кластера, що складається з трьох послідовних димерів (див. рис. 6.17) з таким обмеженням: на кожному шестиспіновому кластері може бути розташовано не більше одного триплетного збудження. Ця жорстка умова впливає з того факту, що в критичному полі між синглетним димером і фазою 1/3 плато конфігурація основного стану може бути побудована з кластерів трьох послідовних димерів, визначених гамільтоніанами (6.68), де кожен кластер може містити не більше одного триплетного збудження. Отже, такі триплетні збудження повинні підкорятися жорсткому обмеженню: триплони не можуть бути створені на чотирьох суміжних (найближчих) димерах, і таке правило виключення має бути додатково розширено для вертикально (горизонтально) орієнтованого димера на його два однаково орієнтовані дальші сусідні димери в горизонтальному (вертикальному) напрямку (див. рис. 6.22).

Надалі нашу увагу буде зосереджено на межі фаз між синглет-димерною та стрічковою фазами, тобто областю магнітного поля, достатньо близькою до першого критичного поля h_{c1} , де низькотемпературна крива намагніченості моделі Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда найцікавіша (див. огляд [125]). З цією метою буде розглянуто гамільтоніан (6.92) спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда в критичному полі $h = h_{c1}$ з точно відомим основним

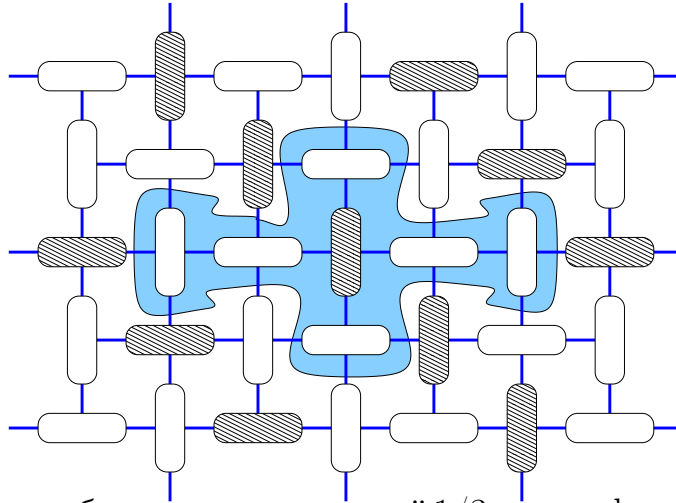


Рис. 6.22. Схематичне зображення смужкової $1/3$ -плато фази та умови жорсткого відштовхування для триптонів. Заштрихованими (порожніми) овалами позначено $S^z = 1$ триплетні (синглетні) стани на димерах. Зафарбована синім кольором область вказує на умову жорсткого відштовхування для центрального триплтона (димера в триплетному стані), яке виключає триплтони на всіх його чотирьох найближчих сусідніх димерах, а також два однаково орієнтованих подальших сусідніх димера вздовж одного просторового напрямку.

станом як незбурену частину гамільтоніана (6.91) відповідної моделі Гайзенберга. Решта доданків гамільтоніана (6.91), що включає XU частину міждиммерної взаємодії, розглядається як збурення разом із відхиленням магнітного поля від критичного значення h_{c1} :

$$H' = J'_{xy} \sum_{\langle(l,m)\rangle} (s_l^x s_m^x + s_l^y s_m^y) - (h - h_{c1}) \sum_1 s_1^z. \quad (6.95)$$

Тут ми ввели окреме позначення J'_{xy} для XU частини міждиммерного зв'язку. У всіх кінцевих виразах ми покладемо $J'_{xy} = J'$.

6.4.1. Ефективна модель триптонних збуджень

Застосуємо теорію збурень багатьох частинок (див., наприклад, [242] для загальної процедури) до XU частини міждиммерної взаємодії на межі між синглет-диммерною і стрічковою фазами, де основний стан є макроскопічно виродженим і може бути представлений як ґратковий газ триплетних збуджень на димерах. У

другому порядку теорії збурень можна отримати наступний ефективний гамільтоніан, якщо виключити з розгляду два високоенергетичні триплетні стани $|2\rangle_{i,j}$, $|3\rangle_{i,j}$ кожного димера, зберігаючи лише синглетний стан $|0\rangle_{i,j}$ і повністю поляризований триплетний стан $|1\rangle_{i,j}$ (докладніше див. у додатку до статті [29]):

$$\begin{aligned}
H_{eff} &= \mathcal{P}_0[E_0 + H_1 + H_t + H_2 + H_3 + \dots]\mathcal{P}_0, \\
H_1 &= (e_0 + h_{c1} - h) \sum_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}}, \quad \mathbf{l} = (l_x, l_y), \\
H_2 &= V_1 \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} + V_2 \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle'} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} + V_3 \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}'' \rangle} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}''}, \\
H_3 &= V_{\Delta 1} \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle_1} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} n_{\mathbf{l}''} + V'_{\Delta 1} \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle'_1} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} n_{\mathbf{l}''} + V_{\Delta 2} \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle_2} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} n_{\mathbf{l}''} \\
&\quad + V'_{\Delta 2} \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle'_2} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} n_{\mathbf{l}''} + V''_{\Delta 2} \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle''_2} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} n_{\mathbf{l}''} + V_{\Delta 3} \sum_{\langle \mathbf{l}, \mathbf{l}' \rangle_3} n_{\mathbf{l}} n_{\mathbf{l}'} n_{\mathbf{l}''}, \\
H_t &= t \sum'_{i,j=1}^N (n_{i,j-1} + n_{i,j+1}) (a_{i-1,j}^+ a_{i+1,j} + a_{i-1,j} a_{i+1,j}^+) \\
&\quad + t \sum''_{i,j=1}^N (n_{i-1,j} + n_{i+1,j}) (a_{i,j-1}^+ a_{i,j+1} + a_{i,j-1} a_{i,j+1}^+). \tag{6.96}
\end{aligned}$$

Символ сумування \sum' (\sum'') позначає обмеження непарних ($i+j$) (парних ($i+j$)), яке поширюється на всі вертикальні (горизонтальні) димери та \mathcal{P}_0 — це оператор проєкції, що включає умову жорсткого відштовхування для триплонів (див. рис. 6.22). Кожен вузол ефективної моделі (6.96) відповідає димеру ґратки Шастри-Сазерленда, а порожній (заповнений) вузол $n_{\mathbf{l}} = 0$ ($n_{\mathbf{l}} = 1$) ефективної моделі відповідає синглетному стану $|0\rangle_{\mathbf{l}}$ (триплетному стану $|1\rangle_{\mathbf{l}}$) 1-го димера вихідної моделі Шастри-Сазерленда (6.91). На додаток до оператора числа заповнення $n_{\mathbf{l}}$ ми також ввели оператори народження та знищення жорстких бозонів $a_{\mathbf{l}}^+$ і $a_{\mathbf{l}}$, які описують перетворення 1-го димера з синглетного стану $|0\rangle_{\mathbf{l}}$ у триплетний $|1\rangle_{\mathbf{l}}$ і навпаки. Фізичний зміст окремих членів, що входять до ефективного гамільтоніана (6.96), такий: H_1 відповідає перенормованій енергії окремого триплону, H_2 описує ефективні парні взаємодії між триплонами, розміщеними на подальших сусідніх димерах (див. рис. 6.23), H_3 містить найважливіші внески

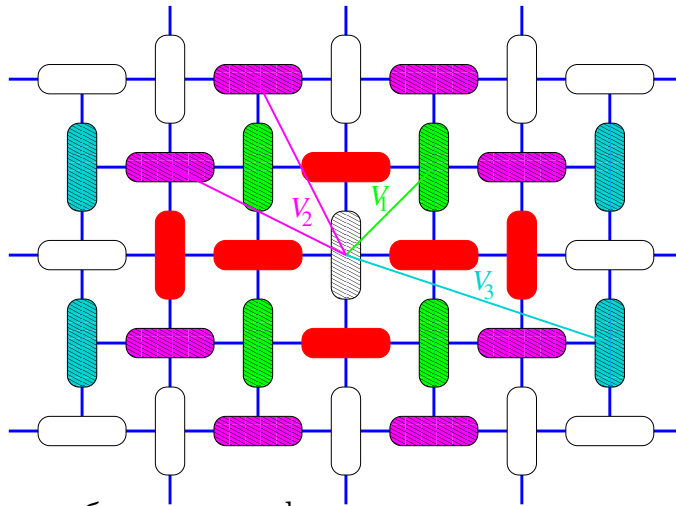


Рис. 6.23. Схематичне зображення ефективних парних взаємодій між триплонами. Червоні овали навколо центрального димера в триплетному стані (штриховий овал) демонструють умову жорсткого відштовхування, кольорові овали вказують на взаємодію між центральним трипліоном і його подальшими сусідами.

серед ефективних тричастинкових взаємодій між трипліонами (див. рис. 6.24), а H_t представляє член скорельованих перескоків (див. рис. 6.25). Параметр скорельованого перескоку t , енергія окремого трипліона e_0 і всі ефективні потенціали взаємодії V , що виникають у рівнянні (6.96), є аналітичними функціями J , J' і h , як це видно з явних виразів, наведених у додатку до статті [29].

До другого порядку теорії збурень доданок, який відповідає прямим перескокам трипліонів, відсутній. Однак слід зазначити, що такі члени є незначно малими також у звичайному підході сильного зв'язку, починаючи з невзаємодіючих димерів, де вони з'являються лише у шостому порядку теорії збурень [289]. На відміну від ефективного гамільтоніана (6.96), попередні пертурбативні теорії [134, 135, 362] також включають члени скорельованих перескоків, пов'язані з конфігураціями з трипліонами на найближчих горизонтальних і вертикальних димерах. Врахування останніх доданків може призвести до появи в системі квантового стану з делокалізованими збудженнями трипліонів. Слід зазначити, що в розробленій теорії збурень (6.96) стани з трипліонами на найближчих горизонтальних і вертикальних станах заборонені через умову жорсткого відштовхування, схематично зображену на рис. 6.22. Таким чином, вищезазначені корельовані члени стриб-

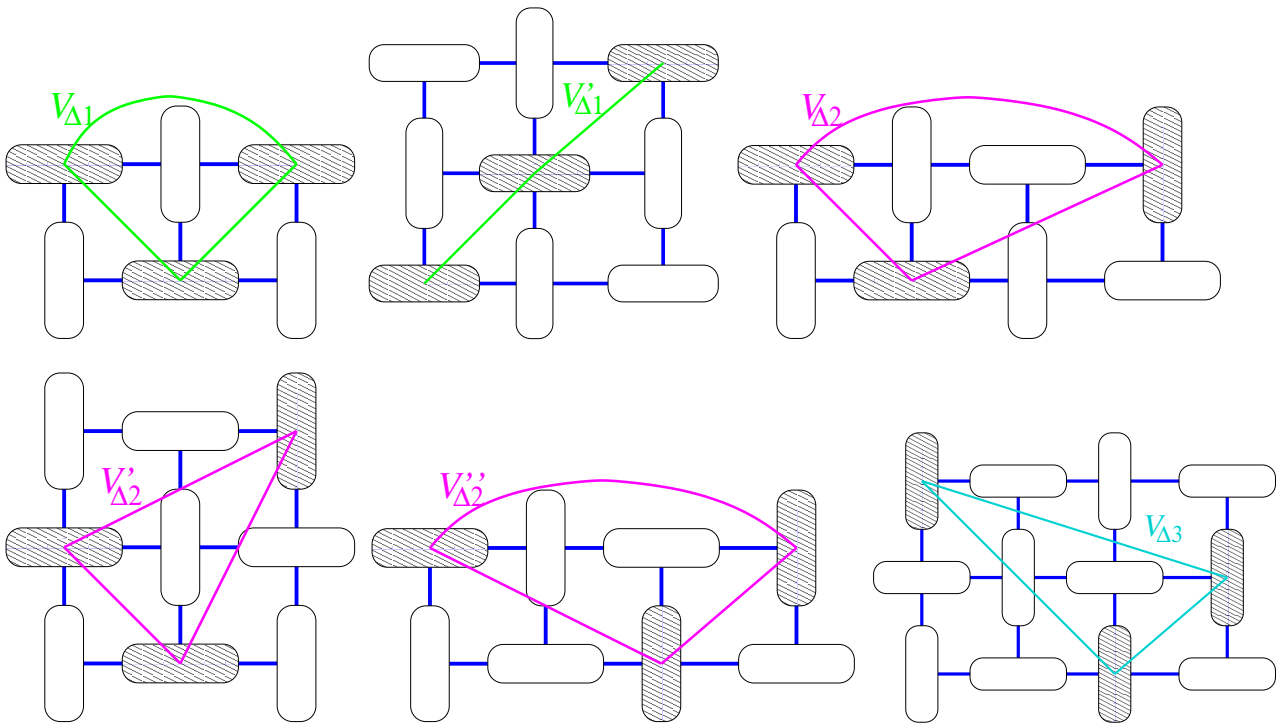


Рис. 6.24. Схематичне зображення ефективної тричастинкової взаємодії між триплонами.

ків не з'являться навіть у вищих порядках нашої теорії збурення. Для повноти, залежності констант ефективної взаємодії від відношення взаємодій J'/J наведено на рис. 6.26. Загалом величини ефективних взаємодій відносно малі для всіх значень J'/J , які стабілізують синглет-димерну фазу при нульовому магнітному полі. Крім того, три ефективні парні взаємодії зазвичай слабшають із відстанню між димерами. Дивно, але параметр корельованого стрибка переважає при досить малих значеннях співвідношення взаємодії J'/J , тоді як ефективна парна взаємодія V_1 між найближчими триплонами, дозволена попри жорстке відштовхування (рис. 6.22) переважає при вищих значеннях коефіцієнта зв'язку J'/J . З рис. 6.26(a) і (b) очевидно, що ефективні взаємодії трьох частинок набагато менші за величиною, ніж ефективні парні взаємодії, і, отже, вони не мають суттєвого впливу на границях фаз між різними основними станами. Крім того, величина ефективних тричастинкових взаємодій швидко спадає з відстанню між триплонами. Слід зазначити, що повний ефективний гамільтоніан, отриманий до другого порядку, також міститиме ефективні багаточастинкові взаємодії вищого порядку (наприклад, чотири-, п'яти-, шестичастинкові зв'язки). Проте очікується, що їх

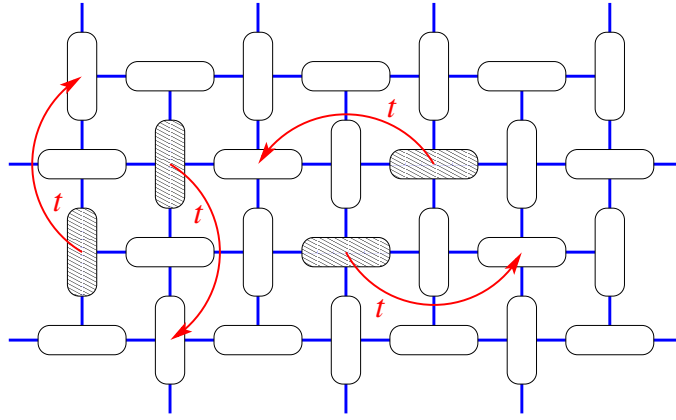


Рис. 6.25. Схематичне зображення скорельованих перескоків двох триплонів, які розміщені на двох наступних після найближчих сусідніх димерах. Стрілки вказують можливі перскоки триплонів всередині пари.

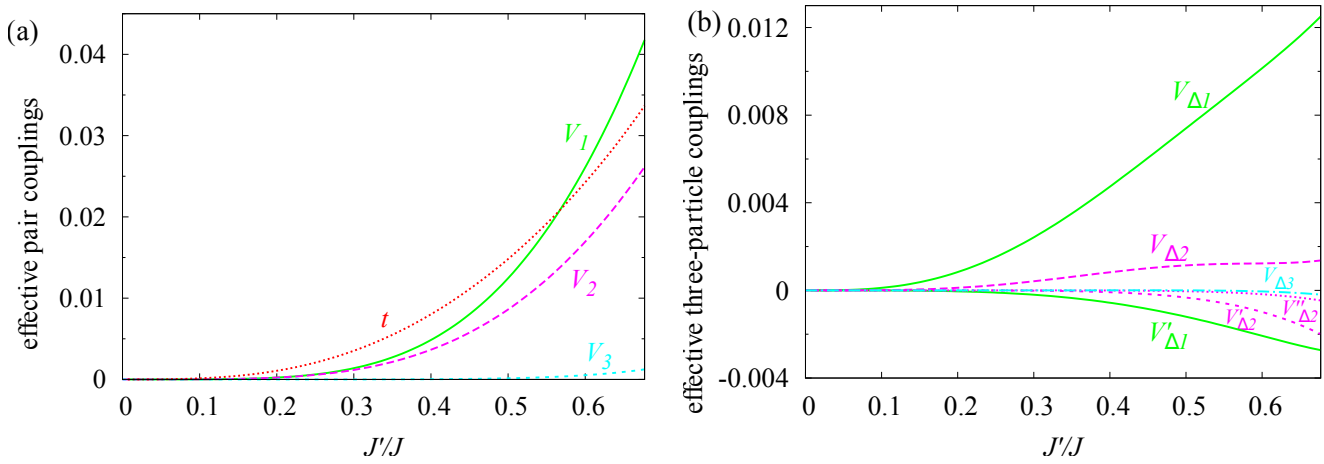


Рис. 6.26. Ефективні парна (а) і тричастинкова (б) взаємодії (6.96), нормалізовані відносно димерної взаємодії J як функція J'/J . Константу скорельованого перескоку показано на панелі (а) як штриховану лінію разом із ефективними парними взаємодіями.

значення будуть значно меншими порівняно з ефективними тричастинковими взаємодіями. Ця гіпотеза базується на спостереженні, що ефективні взаємодії трьох частинок набагато (на порядок) менші, ніж парні, і їх значення швидко спадають із відстанню між триплонами. Нижче ми показуємо, що тричастинкова взаємодія призводить до невеликих поправок до поля переходу між різними фазами. Таким чином, не передбачається, що ефективні взаємодії вищого порядку матимуть будь-який істотний вплив, тому ми виключили всі ці члени з ефективного гамільтоніана (6.96).

Як перший крок ми знайшли фазову діаграму основного стану спін-1/2 мо-

делі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда, ігноруючи вклад скорельованих перескоків, які можуть здатися неважливими через сильне відштовхування між близько розташованими триплонами. Аналіз останніх квантових членів відкладено до наступного підрозділу 6.4.2. Таким чином, проблема стає еквівалентною пошуку триплонної конфігурації з найнижчою енергією ефективного класичного гамільтоніана (6.96) без доданків скорельованих перескоків. Можна довести, що основний стан містить фази, які відповідають дробовим плато намагніченості $1/8$, $1/6$ і $1/4$ (див. деталі у додатку [29]).

Перше дробове плато намагніченості, яке виникає під час накладання магнітного поля, є $1/8$ -плато. Відповідний основний стан відповідає найщільнішому пакуванню триплонів, який дозволяє уникнути будь-яких відштовхувальних парних і тричастинкових взаємодій між ними. Фаза плато $1/8$ відповідає сильно виродженій множині станів. Найпростіший стовпчастий і шаховий порядок розташування вертикальних триплонів показаний на рис. 6.27 (а) і (b), відповідно. При цьому, найзагальнішу конфігурацію можна отримати, коли змішуються фази з вертикальним і горизонтальним упорядкуванням триплонів.

При подальшому збільшенні магнітного поля фаза плато $1/6$ починає домінувати. Відповідний основний стан демонструє стовпчасті впорядкування триплонів, що розвиваються або на горизонтальних, або на вертикальних димерах. Остання конфігурація схематично показана на рис. 6.27(c). Виродження основного стану на межі між фазами плато $1/8$ і $1/6$ є важливою особливістю. Можна показати [29], що енергія конфігурацій є інваріантною щодо деяких локальних змін конфігурації триплонів. Таким чином, будь-яке значення намагніченості між $1/8$ і $1/6$ можна досягнути таким видом заміщення. Зокрема, фаза плато $2/15$, яка була ідентифікована в статтях [127, 128] і також виявлена експериментально [193], може бути відтворена в межах даного підходу як один із багатьох співіснуючих станів на відповідній міжфазній границі. Отже, цілком правдоподібно припустити, що фаза плато $2/15$ може зрештою виникнути, коли розраховувати вищі порядки теорії збурень.

Наступним послідовним основним станом є фаза $1/4$ -плато, яка демонструє

стрічкові розташування триплонів на вертикальних або горизонтальних димерах. Рисунок 6.27(d) ілюструє окремий випадок, коли триплони мають вертикальне розташування. Зауважимо, що стрічковий характер фази 1/4-плато пов'язаний з ефективними взаємодіями трьох частинок $V_{\Delta 1}$ і $V'_{\Delta 1}$, оскільки зигзагоподібний візерунок розташування триплонів має таку саму енергію, як і стрічковий, коли нехтувати ефективними тричастинковими зв'язками $V_{\Delta 1}$ і $V'_{\Delta 1}$. З іншого боку, ефективні тричастинкові взаємодії набагато слабші, ніж парні, і тому зигзагоподібна конфігурація, згадана вище, може виникнути навіть при порівняно малих температурах.

Останнім можливим основним станом у цій картині є фаза плато 1/3, схематично зображена на рис. 6.22, де показано інше стрічкове впорядкування триплонів, яке одночасно є їх найщільнішим упакуванням, що задовольняє умові жорсткого відштовхування, ілюструється синім затіненням. Таким чином, можна зробити висновок, що поточний розгляд ефективних зв'язків між триплонами призводить до появи трьох додаткових основних станів, що виникають між синглет-димерною та стрічковою фазами (див. рис. 6.27).

Енергії основного стану всіх вищезгаданих фаз на один димер легко розраховуються:

$$\begin{aligned}
 E_{1/8} &= \frac{1}{8}(-h + h_{c1} + e_0), \\
 E_{1/6} &= \frac{1}{6}(-h + h_{c1} + e_0 + 2V_3), \\
 E_{1/4} &= \frac{1}{4}(-h + h_{c1} + e_0 + V_1 + V_3 + V'_{\Delta 1} + 2V_{\Delta 3}), \\
 E_{1/3} &= \frac{1}{3}(-h + h_{c1} + e_0 + V_1 + 2V_2 + V'_{\Delta 1} + 2(V_{\Delta 2} + V'_{\Delta 2} + V''_{\Delta 2})). \quad (6.97)
 \end{aligned}$$

Слід зазначити, що всі фази дробового плато є точними власними станами ефективного гамільтоніана (6.96). Фази плато 1/8 та 1/6 містять лише локалізовані триплони. З іншого боку, корельовані стрибки триплонів, розміщених на наступних найближчих сусідніх димерах (див. рис. 6.25), гіпотетично можливі у фазах 1/4- та 1/3-плато, проте вони пригнічуються через стрічкове розташування триплонів, що задовольняє умову жорсткого відштовхування, зображену на

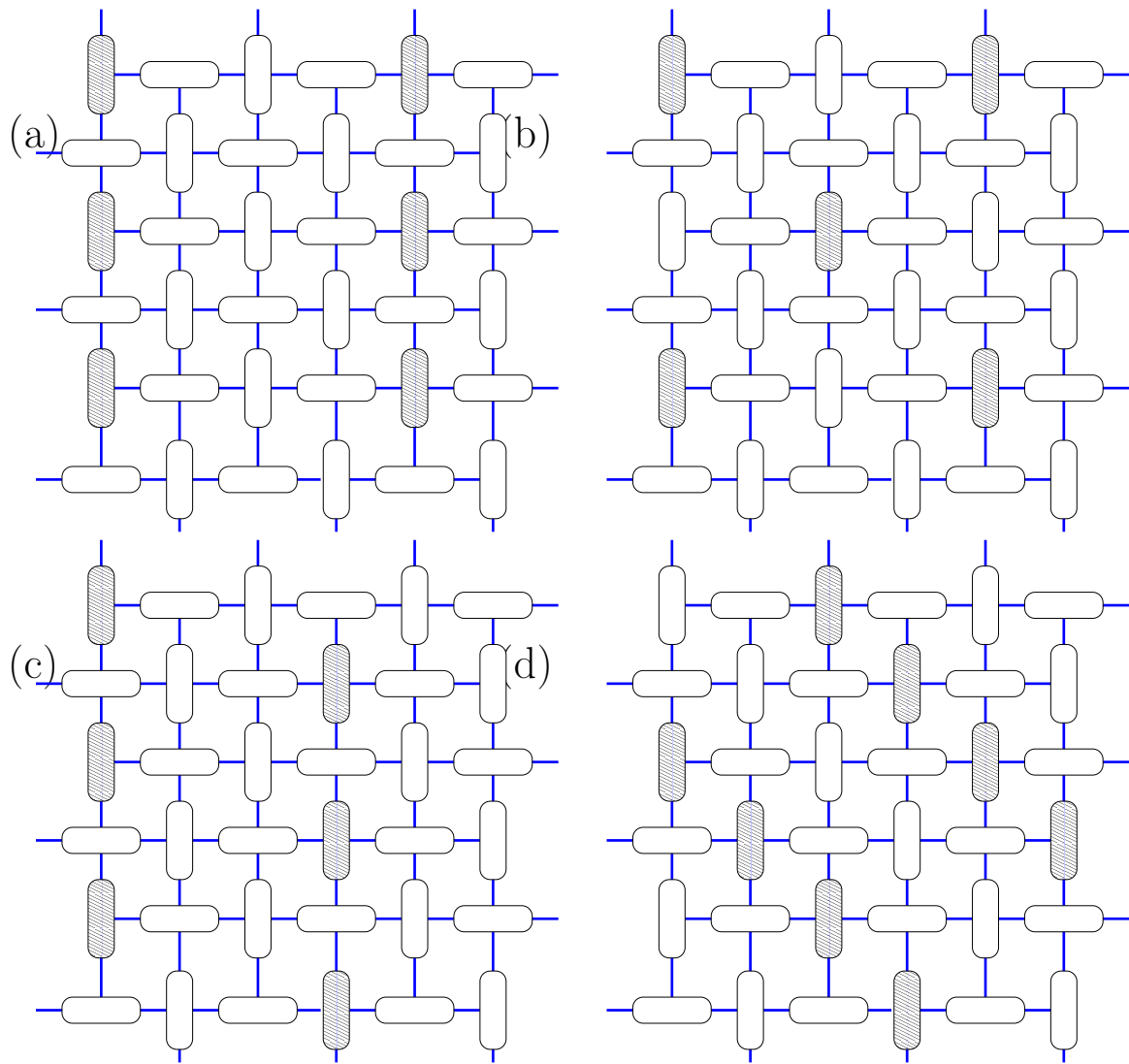


Рис. 6.27. Схематична ілюстрація основних станів моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда, що виникає в області слабого поля як плато дробової намагніченості: (а)-(б) конфігурація смуги та шахової дошки для 1/8-плато [363]; (в) 1/6-плато; (д) 1/4-плато.

рис. 6.23. Критичні поля, що розмежовують окремі основні стани, можна легко знайти шляхом прямого порівняння відповідних власних енергій, наведених у рівняннях (6.97):

$$\begin{aligned}
 h_{0-1/8} &= h_{c1} + e_0, \\
 h_{1/8-1/6} &= h_{c1} + e_0 + 8V_3, \\
 h_{1/6-1/4} &= h_{c1} + e_0 + 3V_1 - V_3 + 3V'_{\Delta 1} + 6V_{\Delta 3}, \\
 h_{1/4-1/3} &= h_{c1} + e_0 + V_1 + 8V_2 - 3V_3 + V'_{\Delta 1} + 8(V_{\Delta 2} + V'_{\Delta 2} + V''_{\Delta 2}) - 6V_{\Delta 3}. \quad (6.98)
 \end{aligned}$$

Критичні поля (6.98), отримані в рамках розробленої теорії збурень, можуть бути прямо використані для побудови загальної фазової діаграми основного стану моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда, яку зображено на рис. 6.28 в площині $J'/J - h/J$ разом з доступними числовими даними, отриманими раніше за допомогою методів CORE [126] та iPEPS [131]. Пряме порівняння критичного поля $h_{1/4-1/3}$ з відповідними числовими даними методів CORE [126] та iPEPS [131] означає, що межа фази між 1/4- і 1/3-плато відтворюється розробленою схемою теорії збурень з винятково високою точністю до співвідношення $J'/J \approx 0.5$. Фазова межа між 1/6- і 1/4-плато також знаходиться в прийнятній відповідності з результатом методу iPEPS [131] навіть до вищих значень співвідношення взаємодії $J'/J \approx 0.6$. Відхилення наших результатів від методу CORE [126] для межі фаз між 1/6- і 1/8-плато можна пояснити обмеженнями скінченного розміру. Розроблений підхід сильного зв'язку передбачає відносно широкий інтервал поля для фази плато 1/6 і невелику ширину фази плато 1/8, тоді як плато 2/15 співіснує на межі фаз між 1/8- і 1/6-плато. Однак цей висновок, здається, суперечить експериментальним спостереженням для $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$, де навпаки було виявлено відносно широке 1/8-плато [192].

Отримані результати дозволяють зрозуміти, чи вони здатні описати фізичні властивості $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ при низьких температурах. З рис. 6.28 видно, що фазові межі 1/4-плато залежать лінійно від J'/J поблизу правдоподібних значень співвідношення взаємодії $J'/J \approx 0.6$. Використовуючи лінійне наближення для цих границь фази та експериментально спостережуваних полів $\mu_0 \mathbf{H}_1^{exp} = 33 \text{ Т}$ і $\mu_0 \mathbf{H}_2^{exp} = 39 \text{ Т}$, які визначають нижні межі 1/4- та 1/3-плато $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$, знайдено абсолютні значення констант взаємодії $J/k_B = 85.4 \text{ К}$ та $J'/k_B = 54.1 \text{ К}$. Зауважте, що ці конкретні значення констант взаємодії, а також відносна величина співвідношення $J'/J = 0.634$ тісно збігаються з раніше повідомленим набором параметрів, отриманих із температурної залежності магнітної сприйнятливості [364]. Далі, виведені константи зв'язку передбачають для фаз із характером локалізованих триплетів таке критичне поле $\mu_0 \mathbf{H}_{1/6-1/4} = 33 \text{ Т}$ між 1/6- та 1/4-плато та $\mu_0 \mathbf{H}_{1/8-1/6} = 28 \text{ Т}$ між 1/8- та 1/6-плато відповідно. Встановлено, що енер-

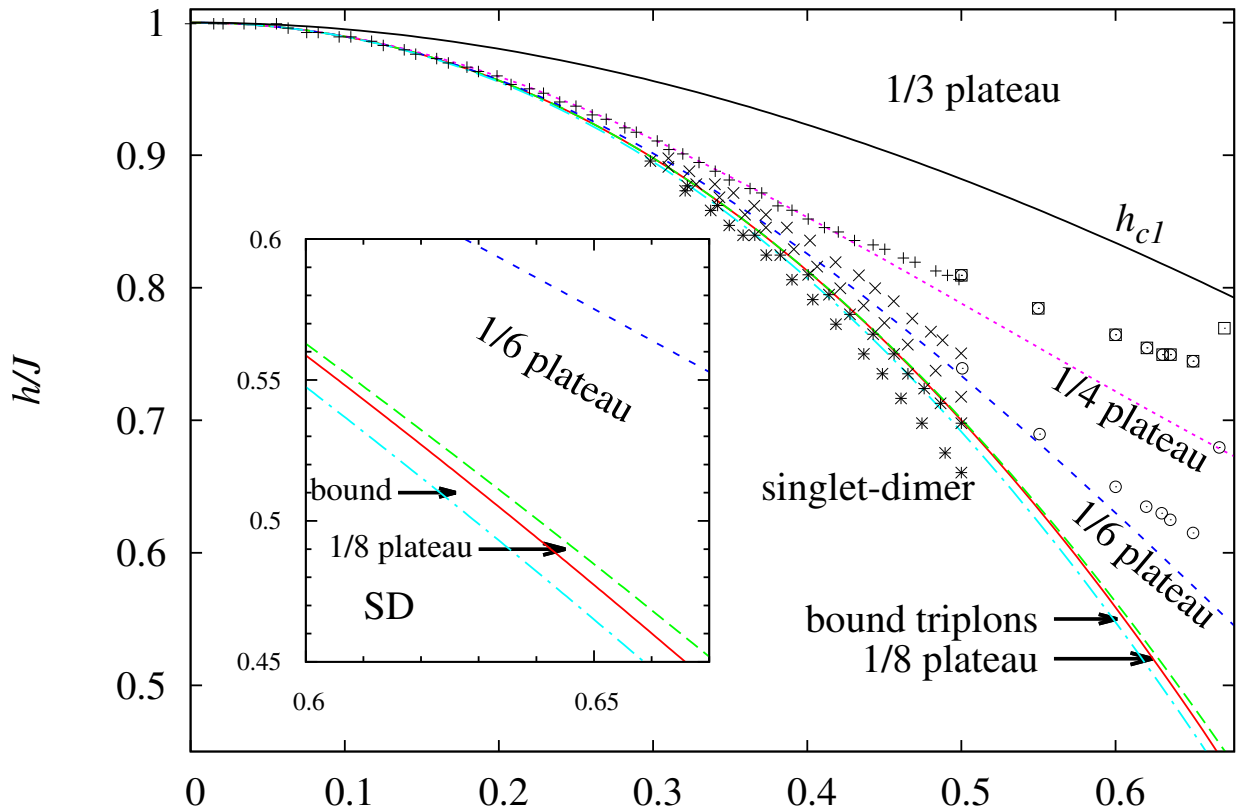


Рис. 6.28. Фазова діаграма основного стану спіну-1/2 моделі Гайзенберга на ґратці Шастри-Сазерленда в площині $J'/J - h/J$. Критичні поля (6.98), отримані в рамках теорії збурень, яка була розроблена з точно розв'язної моделі Ізинґа-Гайзенберга до другого порядку, показані лініями різних стилів: $h_{0-1/8}$ (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). Найнижча штрихпунктирна лінія відповідає критичному полю $h_{bound-t}$ (6.102), розглянутому в підрозділі 6.4.2. 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 [126]. Порожні квадрати та кружечки показують результати iPEPS для нижніх критичних полів 1/3- та 1/4-плато відповідно [131]. На вставці показано збільшений масштаб фазової діаграми для інтервалу J'/J , близького до імовірних мікроскопічних параметрів для $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$.

гія локалізованого триплону в нульовому полі становить 43 К, що трохи вище, ніж енергетичний розрив $\Delta/k_B = 35$ К, який експериментально спостерігається при нульовому магнітному полі [363]. Однак повна квантова спінова модель для $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ є набагато складнішою і включає, серед іншого, слабку взаємодію

Дзялошинського-Морія [141, 202, 203] і можливо малі міжплощинні [365] взаємодії.

6.4.2. Квантова скорельована фаза зв'язаних триплонів

Наявність квантових доданків та розширеного жорсткого відштовхування роблять розв'язок повної ефективної моделі (6.96), включаючи скорельовані перескоки, досить складним. Підхід середнього поля не здатний забезпечити належний опис квантового руху триплонів із сильним зв'язком короткосяжним зв'язування. У нашому випадку скорельовані тунелювання можуть бути заблоковані сильним відштовхуванням між двома триплонами на димерах наступного найближчого сусіда. З іншого боку, пара зв'язаних триплонів може отримати навіть меншу енергію внаслідок квантових поправок.

Єдиний доступний точний результат обмежений точкою нестійкості, де енергія одного делокалізованого зв'язаного триплонного стану стає меншою за енергію двох окремих триплетних димерів. У цьому випадку зв'язані триплони починають заповнювати спінові димери, що призводить до складної квантової фази. Спочатку позначимо стан зв'язаних горизонтальних триплонів у положеннях ґратки (i, j) та $(i + 1, j + 1)$ як $|1_{i,j}1_{i+1,j+1}\rangle$. Дія ефективного гамільтоніана (6.96) може бути прямо обчислена як

$$H_{eff}|1_{i,j}1_{i+1,j+1}\rangle = [2(e_0 + h_{c1} - h) + V_1]|1_{i,j}1_{i+1,j+1}\rangle + t(|1_{i-1,j+1}1_{i,j}\rangle + |1_{i+1,j+1}1_{i+2,j}\rangle). \quad (6.99)$$

Зрозуміло, що рух триплонної пари є одновимірним, тобто зв'язані триплони на горизонтально (вертикально) орієнтованих димерах рухаються в горизонтальному (вертикальному) напрямку. Тому для зв'язаного триплонного стану зручно ввести наступне позначення: $|\tilde{1}_i\rangle = |1_{i,j}1_{i+1,j+1}\rangle$, $|\tilde{1}_{i+1}\rangle = |1_{i+1,j+1}1_{i+2,j}\rangle$, і так далі. Тут ми зберегли лише індекс, що відповідає напрямку руху триплонів. Тепер ми можемо написати рівняння для власних енергій збудження одиничного зв'язаного триплонного стану в досить простій формі

$$[2(e_0 + h_{c1} - h) + V_1]|\tilde{1}_i\rangle + t(|\tilde{1}_{i-1}\rangle + |\tilde{1}_{i+1}\rangle) = E|\tilde{1}_i\rangle. \quad (6.100)$$

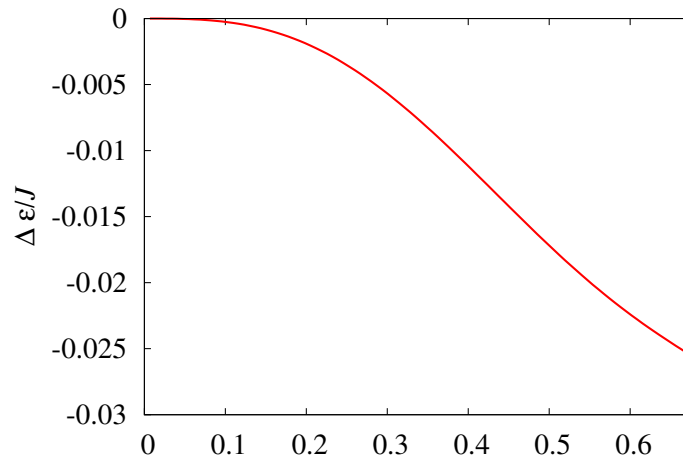


Рис. 6.29. Різниця енергій між парою зв'язаних триплонів та двома локалізованими триплонами як функція співвідношення взаємодій J'/J .

З урахуванням періодичних граничних умов розв'язок різницевого рівняння має вигляд вільної хвилі: $|\phi_k\rangle = \sum_l \exp(ikl)|\tilde{1}_l\rangle$ з таким спектром

$$\epsilon(\kappa) = 2t \cos(\kappa) + 2(e_0 + h_{c1} - h) + V_1. \quad (6.101)$$

де $\kappa = 2\pi l/N_x$ і $l = 0, 1, \dots, N_x$ (N_x — кількість димерів у горизонтальному напрямку). Звичайно, енергетичний спектр і власний стан вертикально орієнтованих триплонів мають аналогічний вигляд. Важливо порівняти мінімальну енергію зв'язаного триплонного стану $\epsilon(\pi) = -2t + 2(e_0 + h_{c1} - h) + V_1$ з енергією двох окремих (невзаємодіючих) триплонів $2E_{\text{triplon}} = 2(e_0 + h_{c1} - h)$. Різницю двох енергій $\delta\epsilon = \epsilon(\pi) - 2E_{\text{triplon}}$ приведено на рис. 6.29, де показано, що стан вільної хвилі зв'язаних триплонів завжди має меншу енергію, ніж пара локалізованих триплонів. Завдяки цьому квантова фаза зв'язаних триплонів повинна з'явитися при низьких магнітних полях раніше аніж кристал локалізованих триплонів. Критичне поле для виникнення квантової зв'язаної триплонної фази при досить низьких магнітних полях визначається формулою

$$h_{\text{bound-t}} = e_0 + h_{c1} - t + V_1/2. \quad (6.102)$$

Відповідна межа квантової фази зв'язаних триплонів зображена на фазовій діаграмі основного стану разом з усіма іншими межами фаз (див. також вставку на рис. 6.28). Цілком очевидно, що енергія квантового стану зв'язаних триплонів

швидко зростає зі збільшенням їх числа, і тому область стабільності такої квантової фази обмежена дуже вузьким діапазоном магнітних полів. Крім того, поведінка цієї квантової фази при більших магнітних полях, коли густина зв'язаних триплетів стає макроскопічною, вимагає детальнішого дослідження.

6.5. Висновки

Квантові спінові моделі з сильними димерними взаємодіями досліджено в межах строгого і пертурбативного підходів. Особливу увагу приділено ортогонально-димерним моделям в одному та двох вимірах. За допомогою строгого підходу, заснованого на методі трансфер-матриці, отримано точні вирази для статистичної суми та ретельно проаналізовано основний стан і термодинамічні властивості ортогонально-димерного ланцюжка з димерними Гайзенберговими та міждимерними Ізинговими взаємодіями. Отримано фазову діаграму основного стану моделі в магнітному полі та показано, що виникають два дробових плато $1/4$ та $1/2$ намагніченості насичення. Основний стан на межі між різними фазами може бути макроскопічно виродженим, що призводить до ненульової залишкової ентропії. Ми розрахували виродження та залишкову ентропію на всіх міжфазних границях, використовуючи поняття мономерного або димерного покриття ланцюжка [342]. Оскільки, вироджений основний стан впливає на низькотемпературну термодинаміку моделі, ми розрахували ентропію як функцію температури та магнітного поля і продемонстрували посилений магнетокалоричний ефект при наближенні до критичних полів.

Досліджений квантовий спіновий ланцюжок близький до полімерної координаційної сполуки $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$, чия магнітна структура показує своєрідну одновимірну архітектуру з регулярним чергуванням димерних одиниць магнітних іонів Dy^{3+} - Dy^{3+} і Cu^{2+} - Cu^{2+} , складених ортогонально [212]. Вертикальний димер магнітних іонів Dy^{3+} - Dy^{3+} був апроксимований парою спінів Ізинга, тоді як магнітні іони на горизонтальному димері Cu^{2+} - Cu^{2+} були апроксимовані парою спінів Гайзенберга. Важливо, що наша модель включає два різні g -фактори Ланде для

спінів Ізинґа (Dy^{3+}) та Гайзенберґа (Cu^{2+}). Було виявлено, що ця 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 $[Dy_2Cu_2]_n$ при досить низькій температурі $T = 0.5$ К [212]. Найкраща теоретична відповідність доступних експериментальних даних на основі ортогонально-димерного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа свідчить про те, що експериментально спостережувані плато намагніченості можуть бути віднесені до класичної та квантової феримагнітних фаз, заданих рівняннями (6.16) та (6.18) притаманні проміжному $9/11$ - і $10/11$ -плато відповідно.

Аналогічним способом отримано точні результати для основного стану спіну $1/2$ моделі Ізинґа-Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда з димерною XXZ взаємодією Гайзенберґа та міждимерною взаємодією Ізинґа, яка є двовимірною версією ортогонально-димерної моделі. Ця модель демонструє криву намагніченості при нульовій температурі лише з двома проміжними плато на $1/3$ і $1/2$ намагніченості насичення. $1/3$ -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 $1/2$.

Було показано, що підхід сильного зв'язку може бути суттєво вдосконалений для моделей з сильними димерними взаємодіями при розгляді теорії збурень навколо точного розв'язку аналогічної моделі Ізинґа-Гайзенберґа. Удосконалення нової схеми багаточастинкової теорії збурень порівняно зі стандартним методом сильного зв'язку тісно пов'язане з тим фактом, що незбурений гамільтоніан мо-

делі Ізинґа-Гайзенберґа враховує кореляції між усіма взаємодіючими спінами і не розбиває досліджувану квантову спінову систему на менші невзаємодіючі фрагменти. При цьому збурена частина гамільтоніану містить зазвичай лише XU частину взаємодії поза спінами одного димера. Цей підхід застосовано до одного та двовимірної ортогонально-димерної моделі Гайзенберґа в магнітному полі, а також тримеризованого ланцюжка. Примітно, що ортогонально-димерний ланцюжок Гайзенберґа являє собою парадигматичний приклад квантового спінового ланцюжка з безліччю квантових основних станів, які проявляються на кривій намагніченості при нульовій температурі у вигляді нескінченної послідовності крихітних дробових плато намагніченості $n/(2n + 2)$ ($n > 1$), або фази спінової рідини Томонаґи-Латинджерера. Незважаючи на таку складність, ми отримали вражаючу точність удосконаленого підходу сильного зв'язку, на основі точно розв'язної моделі Ізинґа-Гайзенберґа, шляхом прямого порівняння отриманих результатів із сучасними числовими даними, отриманими в рамках методів DMRG і точної діагоналізації.

Для тримеризованого спін-1/2 ланцюжка Гайзенберґа було сформульовано теорію збурень навколо точного розв'язку для фрустрованої гібридної версії такого ланцюжка, спін-1/2 ромбічного ланцюжка Ізинґа-Гайзенберґа. Верхнє та нижнє критичні поля проміжного плато 1/3 тримеризованого ланцюжка Гайзенберґа, отримані в рамках такої теорії збурень, ідеально узгоджуються з числовими даними DMRG до відносно високих значень коефіцієнта зв'язку $J_2/J_1 \lesssim 0.5$ на відміну від стандартного розширення збурень. Запропоновано відносно просту процедуру визначення мікроскопічних параметрів для магнітних сполук із сильним димерним і слабким мономер-димерним зв'язком, які забезпечують відповідні експериментальні реалізації спін-1/2 тримеризованого ланцюжка Гайзенберґа. Ідея того, як однозначно визначити обидві константи зв'язку таких моделей, базується на поєднанні низько- та високотемпературної поведінки магнітної сприйнятливості. Застосована процедура дала для прототипу тримеризованого спінового ланцюжка $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$ такий набір мікроскопічних параметрів $J_1/k_B = 102.67$ К, $J_2/k_B = 29.83$ К, $g = 2.2$, що уточнює набори параметрів, про які повідомля-

лося в попередніх дослідженнях [113, 114, 178]. Проте запропоновану процедуру можна також застосувати для відповідного опису магнітних і термодинамічних властивостей інших полімерних сполук, які мають магнітну структуру спін-1/2 тримеризованого ланцюжка Гайзенберґа, як, наприклад, координаційні полімери на основі міді [366–368].

Наостанок, оптимізований метод сильного зв'язку, який ґрунтується на розгляді XU частини міждимерної взаємодії як збурення, застосовано до вивчення властивостей основного стану спін-1/2 моделі Гайзенберґа на ґратці Шастри-Сазерленда. Наша 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 ми отримали 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 $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [131, 193]. Було детально з'ясовано природу основних станів, що мають відношення до цих дробових плато намагніченості. 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, ми показали, що частина XU міждимерного зв'язку відповідає за існування менших $1/8$ -, $1/6$ - і $1/4$ -плато. Крім того, ми виявили, що основний стан на 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 корельованих стрибкоподібних членів, єдиної квантової частини ефективного гамільтоніана (6.91), яка дозволяє знайти критичне поле як пов'язане з появою 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.

Ми сподіваємося, що висвітлені результати відкривають додаткові можливості для більш точного дослідження інших квантових спінових моделей на основі оптимізованої теорії збурень, розробленої на основі точно розв'язних спінових систем Ізинґа-Гайзенберґа (див. роботу [288] для методологічних деталей і суттєвого огляду літератури щодо точно розв'язних моделей Ізинґа-Гайзенберґа).

РОЗДІЛ 7

НИЗЬКОВИМІРНІ СПІНОВІ ТА СПІН-ЕЛЕКТРОННІ МОДЕЛІ НА ДЕКОРОВАНИХ ҐРАТКАХ

У цьому розділі досліджено квантові стани і термодинаміку ряду квантових моделей на декорованих ґратках в одному та двох вимірах, які в окремих випадках допускають точні розв'язки.

Спін-1/2 та змішаний спін-(1,1/2) октаедричні ланцюжки Гайзенберґа з регулярним чергуванням мономерних вузлів і квадратних плакеток досліджуються за допомогою різних аналітичних і числових методів: варіаційної техніки, підходу локалізованих магнонів, точної діагоналізації і DMRG. Моделі належать до класу плоскостонних систем і має багату фазову діаграму основного стану, включаючи фази зі спонтанно порушеною трансляційною симетрією, які призводять до появи дробових плато намагніченості у зовнішньому магнітному полі. Крім того, вони демонструють аномальну низькотемпературну термодинаміку, близьку до квантових фазових переходів першого і другого родів, керованих полем. Змішаний спін-(1,1/2) ланцюжок додатково характеризується появою фрагментованих кластерних фаз Голдейна.

Двовимірні варіанти декорованих моделей можуть виявляти попри складні структури в основному стані, також температурні фазові переходи при різних умовах. Відомо, що спін-1/2 антиферромагнетик Гайзенберґа на фрустрованій квадратній ґратці, декорованій ромбами, демонструє різні основні фази нульового поля, що складаються з розширених основних станів мономер-димерного і димер-тетрамерного, а також феримагнітного. Використовуючи комбінацію аналітичних аргументів, числові підходи DMRG, точну діагоналізацію, а також розрахунки

квантового методу Монте-Карло, досліджуються властивості цієї системи та відповідної моделі на ґратці Ліба за наявності скінченного магнітного поля. При помірних полях ідентифіковано лінію квантових фазових переходів першого роду між режимами феримагнітної і мономер-димерної фаз. Ця лінія першого порядку тягнеться до скінченних температур, закінчуючись лінією критичних точок, які належать до класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа. Ці фазові переходи можна дослідити строго у випадку спрощеної спин-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами у магнітному полі, яка розраховується за допомогою декоративно-ітераційного перетворення та класичного моделювання Монте-Карло.

Узагальнене декоративно-ітераційне перетворення можна також застосувати до гібридної моделі на подвійно декорованій квадратній ґратці, яка має локалізовані спіни Ізинґа в центральних вузлах ґратки та незв'язані електрони, делокалізовані на парах декорованих вузлів. У припущенні половинного заповнення кожної пари декорованих вузлів досліджується спонтанний антиферромагнітний дальній порядок моделі, а також немонотонна залежність критичної температури від співвідношення між кінетичним доданком, одновузловим відштовхуванням і Ізинґовою взаємодією між локалізованими спінами і незв'язаними електронами.

Основні результати цього розділу викладені у роботах [30–38, 45, 58].

7.1. Квантові фази і термодинаміка октаедричного ланцюжка

Розгляньмо одновимірний ланцюжок октаедрів зі спільними вершинами, схематично зображений на рис. 7.1, який можна розглядати як узагальнення фрустрованого ромбічного ланцюжка [99, 177, 355] і подвійного ланцюжка тетраедрів [369–371]. Гамільтоніан квантової спин-1/2 моделі Гайзенберґа, визначеної на базовому октаедричному ланцюжку, задається таким чином

$$\hat{H} = \sum_{j=1}^N \left[J_1 (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot (\hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}) \right]$$

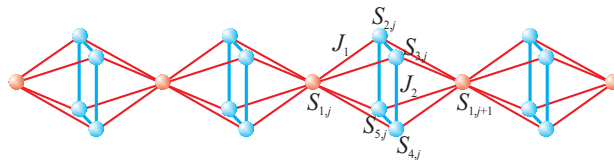


Рис. 7.1. Схематичне зображення октаедричного ланцюжка Гайзенберга. Товсті (блакитні) лінії представляють внутрішньоплакетну взаємодію Гайзенберга J_2 , тоді як тонкі (червоні) лінії відповідають мономерно-плакетній взаємодії J_1 .

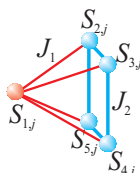


Рис. 7.2. Елементарна комірка октаедричного ланцюжка Гайзенберга, яка складається з п'ятиспінового кластера з геометричною формою квадратної піраміди.

$$+ J_2(\hat{\mathbf{S}}_{2,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{5,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,j}) - h \sum_{i=1}^5 \hat{S}_{i,j}^z \quad (7.1)$$

Тут $\hat{\mathbf{S}}_{i,j} \equiv (\hat{S}_{i,j}^x, \hat{S}_{i,j}^y, \hat{S}_{i,j}^z)$ позначає спін-1/2 оператор на вузлі ґратки, положення якого задано двома індексами, перший визначає позицію в межах елементарної комірки, а останній — координати самої елементарної комірки (див. рис. 7.2). Константа J_1 позначає взаємодію Гайзенберга між сусідніми спінами мономерних і квадратно-плакетних вузлів, яку далі називатимемо мономер-плакетною взаємодією, J_2 означає взаємодію Гайзенберга між найближчими сусідніми спінами з тієї самої квадратної плакетки, яку називатимемо внутрішньоплакетною взаємодією, а член Зеємана $h \geq 0$ враховує магнетостатичну енергію магнітних моментів у зовнішньому магнітному полі. Для простоти накладається періодичні граничні умови $\mathbf{S}_{1,N+1} \equiv \mathbf{S}_{1,1}$. Гамільтоніан (7.1) можна дослідити, використовуючи кілька взаємодоповнюваних аналітичних і числових підходів, які будуть розглянуті далі.

Варіаційний підхід. Точний основний стан спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга можна точно знайти в області сильно фрустрованих параметрів $J_2 > 2J_1$ і досить низьких магнітних полях $h < J_1 + J_2$, використовуючи варіаційний принцип [122, 372]. З цією метою розкладемо загальний гамільтоніан (7.1) спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга на суму за комірковими

гамільтоніанами

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \sum_{k=0}^1 \hat{\mathcal{H}}_{j,k}, \quad (7.2)$$

тоді як комірковий гамільтоніан $\hat{\mathcal{H}}_{j,k}$ включає взаємодії, пов'язані з п'ятиспіновим кластером, який утворює елементарну комірку з геометричною формою квадратної піраміди (див. рис. 7.2)

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}_{j,k} = & J_1 \hat{\mathbf{S}}_{1,j+k} \cdot (\hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}) \\ & + \frac{J_2}{2} (\hat{\mathbf{S}}_{2,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{5,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,j}) - \frac{h}{2} \sum_{i=1}^5 \hat{S}_{i,j}^z. \end{aligned} \quad (7.3)$$

Зауважимо, що множник $1/2$ у двох останніх членах взаємодії дозволяє уникнути подвійного підрахунку взаємодії J_2 всередині плакетки і члена Зеємана h , які симетрично розбиваються на два послідовні клітинні гамільтоніани. Варіаційна процедура дозволяє отримати нижню межу енергії основного стану E_0 спіну-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга

$$E_0 = \langle \Psi_0 | \hat{\mathcal{H}} | \Psi_0 \rangle = \langle \Psi_0 | \sum_{j=1}^N \sum_{k=0}^1 \hat{\mathcal{H}}_{j,k} | \Psi_0 \rangle \geq \sum_{j=1}^N \sum_{k=0}^1 \varepsilon_{j,k}^0, \quad (7.4)$$

оскільки власний вектор основного стану $|\Psi_0\rangle$ можна альтернативно розглядати як варіаційну функцію для п'ятиспінових кластерів Гайзенберга (рис. 7.2). З рівняння (7.4) випливає, що відповідна енергія основного стану E_0 обов'язково повинна бути більшою або дорівнювати сумі власних енергій найнижчої енергії п'ятиспінових кластерів $\varepsilon_{j,k}^0$. Енергетичний спектр п'ятиспінового кластера Гайзенберга (рис. 7.2) із геометричним розташуванням квадратної піраміди можна виразити через п'ять квантових спінових чисел $S_{T,j,k}$, $S_{T,j,k}^z$, $S_{\square,j}$, $S_{24,j}$ і $S_{35,j}$

$$\begin{aligned} \varepsilon_{j,k} = & \frac{J_1}{2} S_{T,j,k} (S_{T,j,k} + 1) + \left(\frac{J_2}{4} - \frac{J_1}{2} \right) S_{\square,j} (S_{\square,j} + 1) \\ & - \frac{J_2}{4} [S_{24,j} (S_{24,j} + 1) + S_{35,j} (S_{35,j} + 1)] - \frac{3}{8} J_1 - h S_{T,j,k}^z, \end{aligned} \quad (7.5)$$

які визначають повний спін квадратної піраміди $S_{T,j,k}$ та її z -компоненти $S_{T,j,k}^z$, повний спін квадратної плакетки $S_{\square,j}$ та сумарний спін двох пар спінів із проти-

лежних кутів квадратної плакетки $S_{24,j}$ та $S_{35,j}$ відповідно. Можна легко переко-
натись з рівняння (7.5), що власний стан з найнижчою енергією п'ятиспінового
кластера Гайзенберга в просторі параметрів $h < J_1 + J_2$ і $J_2 > 2J_1$ є дублетним
станом, який характеризується квантовим спіновим числом $S_{T,j,k} = |S_{T,j,k}^z| = \frac{1}{2}$,
 $S_{\square,j} = 0$, $S_{24,j} = 1$ і $S_{35,j} = 1$. Очевидно, чотири спіни з кожної квадратної пла-
стинки знаходяться в синглет-тетрамерному стані, заданому власним вектором

$$|0, 1, 1\rangle_j = |S_{\square,j}=0, S_{24,j}=1, S_{35,j}=1\rangle = \frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle + |\downarrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle) \\ - \frac{1}{\sqrt{12}}(|\uparrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle + |\uparrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle + |\downarrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle + |\downarrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle) \quad (7.6)$$

і, як наслідок, спіни з мономерних вузлів відокремлені від інших спінів. Цей
власний стан із найнижчою енергією можна легко поширити на весь спін-1/2
октаедричний ланцюжок Гайзенберга, що відповідає мономер-тетрамерному (МТ)
основного стану

$$|\text{MT}\rangle = \prod_{j=1}^N |\uparrow_{1,j}\rangle \otimes \left[\frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle + |\downarrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle) \right. \\ \left. - \frac{1}{\sqrt{12}}(|\uparrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle + |\uparrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle + |\downarrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle + |\downarrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle) \right]. \quad (7.7)$$

У підсумку, спін-1/2 октаедричний ланцюжок Гайзенберга демонструє точний
основний стан МТ у низькопольовій частині $h < J_1 + J_2$ сильно фрустрованої
області параметрів $J_2 > 2J_1$, де чотири спіни з кожної квадратної пластинки
утворюють синглет-тетрамерний стан, а спіни з мономерних вузлів повністю ви-
лаштовуються в напрямку магнітному полі або стають вільними у нульовому полі.
Що стосується ідеального вилаштування всіх мономерних спінів, основний стан
МТ повинен проявлятися як проміжне плато 1/5, присутнє на кривій намагніче-
ності при нульовій температурі в діапазоні полів $h \in (0, J_1 + J_2)$.

Підхід локалізованих магнонів. Цілком зрозуміло, що власний стан із
найменшою енергією спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга при доста-
тньо високих магнітних полях, що перевищують значення насичення, відповідає

повністю поляризованому феромагнітному (FM) стану

$$|\text{FM}\rangle = \prod_{j=1}^N |\uparrow_{1,j}\uparrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle \quad (7.8)$$

з власним значенням енергії $E_{\text{FM}} = E_{\text{FM}}^0 - \frac{5N}{2}h$ і відповідною енергією у нульовому полі $E_{\text{FM}}^0 = N(2J_1 + J_2)$. Далі буде продемонстровано, що концепція незалежних локалізованих магнонів [373, 374] може бути використана в сильно фрустрованій області $J_2 > 2J_1$ для точного визначення поля насичення та основного стану, що виникає нижче поля насичення. Одномагнонні власні стани можна побудувати в ортонормованому базисі $|i, j\rangle = \hat{S}_{i,j}^- |\text{FM}\rangle$ ($i = 1 - 5$, $j = 1 - N$), що належить сектору $S_T^z = \frac{5N}{2} - 1$ з одиничним відхиленням спіну від повністю поляризованого FM стану. Застосування частини гамільтоніана нульового поля (7.1) у заданому базисі призводить до такого набору рівнянь

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}}|1, j\rangle &= (E_{\text{FM}}^0 - 4J_1)|1, j\rangle + \frac{J_1}{2} \sum_{i=2}^5 (|i, j-1\rangle + |i, j\rangle), \\ \hat{\mathcal{H}}|2, j\rangle &= (E_{\text{FM}}^0 - J_1 - J_2)|2, j\rangle + \frac{J_1}{2} (|1, j\rangle + |1, j+1\rangle) + \frac{J_2}{2} (|3, j\rangle + |5, j\rangle), \\ \hat{\mathcal{H}}|3, j\rangle &= (E_{\text{FM}}^0 - J_1 - J_2)|3, j\rangle + \frac{J_1}{2} (|1, j\rangle + |1, j+1\rangle) + \frac{J_2}{2} (|2, j\rangle + |4, j\rangle), \\ \hat{\mathcal{H}}|4, j\rangle &= (E_{\text{FM}}^0 - J_1 - J_2)|4, j\rangle + \frac{J_1}{2} (|1, j\rangle + |1, j+1\rangle) + \frac{J_2}{2} (|3, j\rangle + |5, j\rangle), \\ \hat{\mathcal{H}}|5, j\rangle &= (E_{\text{FM}}^0 - J_1 - J_2)|5, j\rangle + \frac{J_1}{2} (|1, j\rangle + |1, j+1\rangle) + \frac{J_2}{2} (|2, j\rangle + |4, j\rangle), \end{aligned} \quad (7.9)$$

який можна використати для розв'язання проблеми власних значень $\hat{\mathcal{H}}|\Psi_k\rangle = E_k^0|\Psi_k\rangle$ у нульовому полі в одномагнонному секторі, припускаючи $|\Psi_k\rangle = \sum_{i=1}^5 \sum_{j=1}^N c_{i,\kappa} e^{i\kappa j} |i, j\rangle$. Розв'язок задачі на власні значення знаходимо з характеристичного рівняння

$$\begin{vmatrix} -4J_1 - \varepsilon_k & \frac{J_1}{2}(1+e^{-i\kappa}) & \frac{J_1}{2}(1+e^{-i\kappa}) & \frac{J_1}{2}(1+e^{-i\kappa}) & \frac{J_1}{2}(1+e^{-i\kappa}) \\ \frac{J_1}{2}(1+e^{i\kappa}) & -J_1 - J_2 - \varepsilon_k & \frac{J_2}{2} & 0 & \frac{J_2}{2} \\ \frac{J_1}{2}(1+e^{i\kappa}) & \frac{J_2}{2} & -J_1 - J_2 - \varepsilon_k & \frac{J_2}{2} & 0 \\ \frac{J_1}{2}(1+e^{i\kappa}) & 0 & \frac{J_2}{2} & -J_1 - J_2 - \varepsilon_k & \frac{J_2}{2} \\ \frac{J_1}{2}(1+e^{i\kappa}) & \frac{J_2}{2} & 0 & \frac{J_2}{2} & -J_1 - J_2 - \varepsilon_k \end{vmatrix} = 0, \quad (7.10)$$

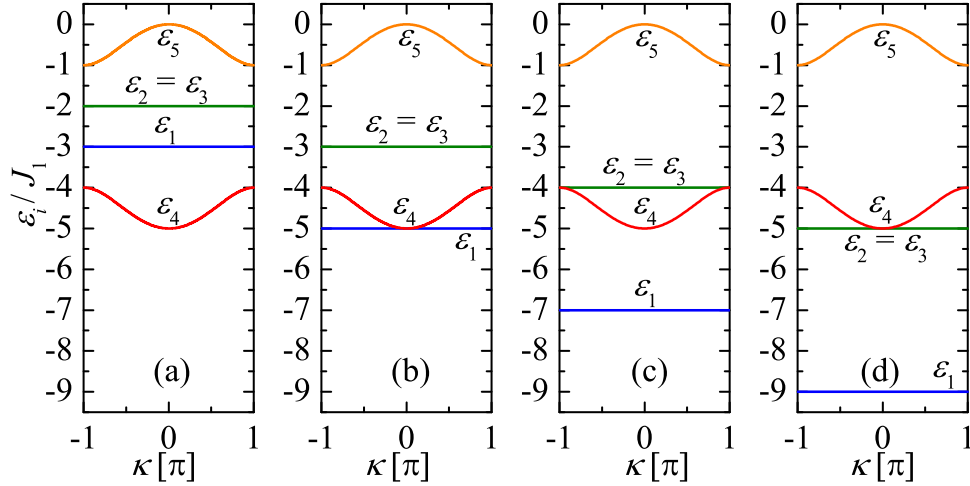


Рис. 7.3. Одномагніонні енергетичні зони (7.11) спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга для чотирьох різних значень співвідношень взаємодій: (a) $J_2/J_1 = 1$; (b) $J_2/J_1 = 2$; (c) $J_2/J_1 = 3$; (d) $J_2/J_1 = 4$.

де $\varepsilon_k = E_k^0 - E_{\text{FM}}^0$ позначає різницю енергії між одномагніонним станом і повністю поляризованим ФМ-станом у нульовому магнітному полі. Одномагніонний енергетичний спектр спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга в нульовому магнітному полі складається з п'яти енергетичних зон

$$\begin{aligned}\varepsilon_1 &= -J_1 - 2J_2, \\ \varepsilon_{2,3} &= -J_1 - J_2, \\ \varepsilon_{4,5} &= -\frac{J_1}{2} \left(5 \pm \sqrt{17 + 8 \cos \kappa} \right),\end{aligned}\quad (7.11)$$

які проілюстровано на рис. 7.3 для кількох обраних значень співвідношення взаємодії J_2/J_1 . Слід зазначити, що три з п'яти одномагніонних енергетичних зон (7.11) є повністю бездисперсійними (плоскими), що означає наявність локалізованих магніонів у плоских зонах [373, 374]. Плоска зона з власною енергією ε_1 відповідає одному магнону, захопленому квадратною плакеткою

$$|lm\rangle_j = \frac{1}{2} \left(\hat{S}_{2,j}^- - \hat{S}_{3,j}^- + \hat{S}_{4,j}^- - \hat{S}_{5,j}^- \right) |\text{FM}\rangle \quad (7.12)$$

і цей одномагніонний стан, що відповідає квантовим спіновим числам $S_{\square,j} = S_{\square,j}^z = S_{24,j} = S_{35,j} = 1$, має найменшу енергію в сильно фрустрованому режимі $J_2 > 2J_1$ (див. рис. 7.3).

Багатомагنونні стани спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга можуть бути отримані шляхом заповнення квадратних плакеток локалізованими магнонами типу (7.12). Власні стани N_1 незалежних одномагنونних станів (7.12), захоплених квадратними плакетками, мають енергію $E_{N_1} = E_{\text{FM}} - N_1(|\varepsilon_1| - h)$, що передбачає таке значення поля насичення $h_s = |\varepsilon_1| = J_1 + 2J_2$ у сильно фрустрованій області $J_2 > 2J_1$. Крім того, можна легко перевірити, що найнижчий енергетичний стан у просторі параметрів $J_2 > 2J_1$ і $h < h_s$ є багатомагنونним станом з найбільшою можливою кількістю (N) незалежних локалізованих магنونів (7.12) на квадратних плакетках

$$\begin{aligned}
 |\text{LM}\rangle = \prod_{j=1}^N |\uparrow_{1,j}\rangle \otimes \frac{1}{2} (& |\downarrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle - |\uparrow_{2,j}\downarrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle \\
 & + |\uparrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\downarrow_{4,j}\uparrow_{5,j}\rangle - |\uparrow_{2,j}\uparrow_{3,j}\uparrow_{4,j}\downarrow_{5,j}\rangle).
 \end{aligned}
 \tag{7.13}$$

Основний стан локалізованих магنونів (7.13) має проявлятися на кривій намагніченості при нульовій температурі як проміжне плато $3/5$, обмежене інтервалом полів $h \in (J_1 + J_2, J_1 + 2J_2)$.

У сильно фрустрованій області параметрів $J_2 > 2J_1$ концепцію локалізованих магنونів [373, 374] також можна пристосувати для точного опису низькотемпературної термодинаміки спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга. За цих умов багатомагنونні стани, побудовані з одномагنونних станів з найнижчою енергією (7.12), дають найбільший вклад в області високих полів $h > J_1 + J_2$, тоді як багатомагنونні стани, включаючи локалізований двомагنونний стан (7.6) найважливіші в області низьких полів $h < J_1 + J_2$. Низькотемпературну термодинаміку спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга можна відповідно переформулювати як модель двокомпонентного ґраткового газу, оскільки кожна квадратна плакетка може містити щонайбільш один локалізований одномагنونний стан (7.12), представлений першим типом частинок з хімічним потенціалом $\mu_1 = J_1 + 2J_2 - h$, або один локалізований двомагنونний стан (7.6), представлений частинками другого роду з хімічним потенціалом $\mu_2 = 2J_1 + 3J_2 - 2h$. Хімічні потенціали μ_1 і μ_2

двох типів частинок визначаються різницею енергій між повністю поляризованим феромагнітним станом (вакуум) і відповідним локалізованим магнонним станом (одномагнонним або двомагнонним станом). Завдяки введенню чисел заповнення $n_{1,j} = 0, 1$ і $n_{2,j} = 0, 1$ для двох видів частинок загальна енергія багатомagnoнних станів визначається як класичний гамільтоніан ґраткового газу

$$\mathcal{H} = E_{\text{FM}} - \mu_1 \sum_{j=1}^N n_{1,j} - \mu_2 \sum_{j=1}^N n_{2,j}. \quad (7.14)$$

Статистична сума октаедричного ланцюжка Гайзенберґа, що враховує всі доступні багатомagnoнні стани, які складаються з низькоенергетичних одномагнонного (7.12) і двомагнонного (7.6) станів впливає з формули

$$\mathcal{Z} = e^{-\beta E_{\text{FM}}} \prod_{j=1}^N \sum_{n_{1,j}} \sum_{n_{2,j}} (1 - n_{1,j} n_{2,j}) e^{\beta(\mu_1 n_{1,j} + \mu_2 n_{2,j})} = e^{-\beta E_{\text{FM}}} \left(1 + e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}\right)^N, \quad (7.15)$$

де $\beta = 1/(k_B T)$, k_B — стала Больцмана, T — абсолютна температура, а множник $(1 - n_{1,j} n_{2,j})$ встановлює жорстке обмеження для обох типів частинок, оскільки кожна квадратна плакетка може містити щонайбільше один одномагнонний стан (7.12), або один двомагнонний стан (7.6), або має залишатися порожнім за умови, що квадратна плакетка повністю поляризована. Вільну енергію Гельмгольца на спін можна розрахувати зі співвідношення

$$f = -k_B T \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{1}{5N} \ln \mathcal{Z} = \frac{1}{5} (2J_1 + J_2) - \frac{h}{2} - \frac{1}{5} k_B T \ln \left(1 + e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}\right). \quad (7.16)$$

Її можна використати для обчислення намагніченості на спін

$$m = \frac{1}{2} - \frac{1}{5} \frac{e^{\beta\mu_1} + 2e^{\beta\mu_2}}{1 + e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2}} \quad (7.17)$$

і питомої теплоємності

$$c = \frac{\mu_1^2 e^{\beta\mu_1} + \mu_2^2 e^{\beta\mu_2} + (\mu_1 - \mu_2)^2 e^{\beta(\mu_1 + \mu_2)}}{5k_B T^2 (1 + e^{\beta\mu_1} + e^{\beta\mu_2})^2}. \quad (7.18)$$

Варто зауважити, що отримані вирази для вільної енергії Гельмгольца (7.16), намагніченості (7.17) і питомої теплоємності (7.18) забезпечують адекватний опис

низькотемпературної термодинаміки саме в сильно фрустрованій області параметрів $J_2 > 2J_1$.

Локальний закон збереження та підхід DMRG для ефективних ланцюжків зі змішаним спіном. Однією з важливих особливостей спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга є локальне збереження повного спіну на квадратних плакетках, що прямо впливає з комутаційного співвідношення $[\hat{\mathcal{H}}, \hat{\mathbf{S}}_{\square,j}^2] = 0$ між гамільтоніаном (7.1) і квадратом оператора спіну $\hat{\mathbf{S}}_{\square,j} = \hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}$. Тому зручно переписати частину гамільтоніана з нульовим полем (7.1) через оператор повного спіну квадратної плакетки $\hat{\mathbf{S}}_{\square,j}$ і два допоміжні спінові оператори $\hat{\mathbf{S}}_{24,j} = \hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j}$ і $\hat{\mathbf{S}}_{35,j} = \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}$, пов'язані зі спіновими парами з протилежних кутів квадратних плакеток (див. рис. 7.1 та 7.2)

$$\hat{\mathcal{H}} = J_1 \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\square,j} + \frac{J_2}{2} \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{\square,j}^2 - \hat{\mathbf{S}}_{24,j}^2 - \hat{\mathbf{S}}_{35,j}^2). \quad (7.19)$$

Ефективний гамільтоніан (7.19), очевидно, відповідає феримагнітним змішаним спін-(1/2, $S_{\square,j}$) ланцюжкам Гайзенберга з зсувом власних значень енергії через вклад квантових спінових чисел $S_{\square,j}$, $S_{24,j}$ і $S_{35,j}$, тоді як квантове число, що визначає загальний спін на квадратній плакетці, може досягати трьох різних значень $S_{\square,j} = 0, 1$ і 2 . Звідси впливає, що основний стан вихідної моделі (7.1) можна знайти з власних станів найнижчої енергії ефективного гамільтоніана (7.19), перебираючи всі можливі комбінації квантових спінових чисел. За припущення, що трансляційну симетрію основного стану не порушено, отримуємо лише три ефективні гамільтоніани, які відповідають фрагментованій (парамагнітній) змішаній системі зі спіном 1/2 і спіном 0

$$\hat{\mathcal{H}}_{\frac{1}{2}-0} = -2NJ_2, \quad (7.20)$$

феримагнітний змішаний спін-(1/2, 1) ланцюжок Гайзенберга

$$\hat{\mathcal{H}}_{\frac{1}{2}-1} = J_1 \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\square,j} - NJ_2, \quad (S_{\square,j} = 1) \quad (7.21)$$

і феримагнітний змішаний спін- $(1/2, 2)$ ланцюжок Гайзенберга

$$\hat{\mathcal{H}}_{\frac{1}{2}-2} = J_1 \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\square,j} + NJ_2. \quad (S_{\square,j} = 2). \quad (7.22)$$

Власні значення найнижчої енергії ефективних гамільтоніанів (7.20)-(7.22) спіну- $1/2$ октаедричного ланцюжка Гайзенберга легко знаходяться

$$E_{1/2-0}(2N, S_T^z) = -2NJ_2, \quad (7.23)$$

$$E_{1/2-1}(2N, S_T^z) = 2NJ_1 \varepsilon_{\frac{1}{2}-1}(2N, S_T^z) - NJ_2, \quad (7.24)$$

$$E_{1/2-2}(2N, S_T^z) = 2NJ_1 \varepsilon_{\frac{1}{2}-2}(2N, S_T^z) + NJ_2. \quad (7.25)$$

Тут $\varepsilon_{\frac{1}{2}-S_{\square}}(2N, S_T^z)$ позначає власне значення найменшої енергії на спіну змішаного спіну- $(1/2, S_{\square})$ ланцюжка Гайзенберга з одиничною константою взаємодії та загальною кількістю $2N$ спінів у кожному секторі з z -компонентою повного спіну S_T^z . Найнижче власне значення енергії $E_{\frac{1}{2}-0}(2N, S_T^z) = -2NJ_2$, очевидно, відповідає мономер-тетрамерному основному стану (7.7). Навпаки, ефективні змішані спіни- $(1/2, S)$ ланцюжки Гайзенберга виявляють при досить низьких магнітних полях основний феримагнітний стан Ліба-Матіса, який проявляється в кривій намагніченості як проміжне плато на $(2S - 1)/(2S + 1)$ намагніченості насичення, яка руйнується при квантовому фазовому переході, керованому полем.

Проте не можна виключити й можливість того, що трансляційна симетрія в основному стані спонтанно порушується, а квантове число спіну $S_{\square,j}$, що визначає повний спіну квадратної плакетки, змінюється вздовж ефективного змішаного спіну- $(1/2, S_{\square,j})$ ланцюжка Гайзенберга. Тому ми врахували можливе подвоєння елементарної комірки, розглянувши інший ефективний гамільтоніан феримагнітного змішаного спіну $(1/2, 2, 1/2, 1)$ ланцюжка Гайзенберга

$$\hat{\mathcal{H}}_{\frac{1}{2}-2-\frac{1}{2}-1} = J_1 \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\square,j}, \quad (7.26)$$

який передбачає регулярне чергування повного спіну $S_{\square,2j-1} = 2$ і $S_{\square,2j} = 1$ на непарних і парних квадратних пластинках. Таким чином, інше можливе власне

значення найменшої енергії спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга можна отримати з формули

$$E_{\frac{1}{2}-2-\frac{1}{2}-1}(2N, S_T^z) = 2N J_1 \varepsilon_{\frac{1}{2}-2-\frac{1}{2}-1}(2N, S_T^z), \quad (7.27)$$

де $\varepsilon_{\frac{1}{2}-2-\frac{1}{2}-1}(2N, S_T^z)$ позначає власне значення найменшої енергії на змішаному спін- $(1/2, 2, 1/2, 1)$ ланцюжку Гайзенберга. Найнижчі власні значення енергії $\varepsilon_{\frac{1}{2}-2}(2N, S_T^z)$, $\varepsilon_{\frac{1}{2}-1}(2N, S_T^z)$ і $\varepsilon_{\frac{1}{2}-2-\frac{1}{2}-1}(2N, S_T^z)$ усіх описаних вище ефективних ланцюжків Гайзенберга зі змішаним спіном із загальною кількістю 120 спінів ($N = 60$) були розраховані для всіх доступних секторів з z -компонентою загального спіну S_T^z за допомогою числового методу DMRG.

Важливо, що регулярне чергування повного спіну квадратних плакеток $S_{\square, 2j-1} = 1$ і $S_{\square, 2j} = 0$ призводить до ефективного гамільтоніана феримагнітного змішаного спін- $(1/2, 1, 1/2, 0)$ ланцюжка Гайзенберга, чий власний стан з найнижчою енергією можна знайти аналітично через фрагментацію на парних квадратних плакетках як синглет-тетрамерний стан (7.6) з $S_{\square, 2j} = 0$. Завдяки цьому ефективний змішаний спін- $(1/2, 1, 1/2, 0)$ ланцюжок Гайзенберга розкладається на сукупність змішаних спін- $(1/2, 1, 1/2)$ тримерів Гайзенберга, відокремлених один від одного немагнітним синглетним станом на сусідніх плакетках. Можна легко перевірити, що власний стан з найнижчою енергією фрагментованого змішаного спін- $(1/2, 1, 1/2, 0)$ ланцюжка Гайзенберга є синглетним тетрамером-гексамерним станом:

$$|\text{TH}\rangle = \prod_{j=1}^{N/2} |0, 1, 1, 1, 1\rangle_{2j-1} \otimes |0, 1, 1\rangle_{2j}. \quad (7.28)$$

Явний вигляд синглетного гексамерного стану $|0, 1, 1, 1, 1\rangle_j$ спінового октаедра можна знайти у статті [33].

7.1.1. Основний стан та низькотемпературна термодинаміка спін-1/2 октаедричного ланцюжка

Почнемо з аналізу основного стану при нульовому магнітному полі. Фазова діаграма основного стану нульового поля схематично зображена на рис. 7.4 і включає в себе п'ять різних основних станів (три квантових феримагнітних стани, синглетні тетрамер-гексамерний і мономер-тетрамерний стани) залежно від відношення взаємодій. При малих значеннях $J_2/J_1 < 0.5$ основний стан спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга можна описати як квантовий феримагнітний стан ефективного змішаного спіну-(1/2,2) ланцюжка Гайзенберга [375] з власним значенням енергії (7.25). Інший квантовий феримагнітний основний стан із подвоєним періодом магнітної елементарної комірки відноситься до власного стану з найнижчою енергією (7.27) ефективного змішаного спіну-(1/2, 2, 1/2, 1) ланцюжка Гайзенберга, який виникає лише у відносно вузькій області параметрів $J_2/J_1 \in (0.50, 0.52)$. Останній квантовий феримагнітний основний стан спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга походить від власного стану з найнижчою енергією (7.24) ефективного змішаного спіну-(1/2, 1) ланцюжка Гайзенберга, який має найменшу енергію в області параметрів $J_2/J_1 \in (0.52, 0.91)$. Двочастинний характер ефективного змішаного спін-(1/2, 2) і спін-(1/2, 1) ланцюжків Гайзенберга означає, що два пов'язані квантові основні стани можна ототожнити зі звичайними феримагнітними фазами типу Ліба-Матіса [109]. Той самий висновок можна зробити і для третього квантового феримагнітного основного стану, навіть незважаючи на чотирипідґратковий характер ефективного змішаного спіну-(1/2, 2, 1/2, 1) ланцюжка Гайзенберга виключає просту аргументацію на основі теореми Ліба-Матіса [109].

Окрім трьох вищезгаданих квантових феримагнітних основних станів, розрізняємо також два квантові основні стани, які підлягають фрагментації через синглет-тетрамерний стан (7.6) на квадратних плакетках. Синглетний тетрамер-гексамерний стан (7.28) зі спонтанно порушеною симетрією є власним станом із найнижчою енергією спін-1/2 октаедричного Гайзенберґового ланцюжка при по-

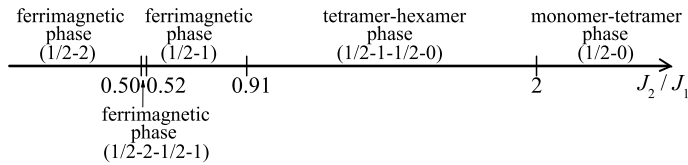


Рис. 7.4. Фазова діаграма основного стану спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга у нульовому полі. Числа в квадратних дужках визначають у заданому основному стані повний спін на мономерних ділянках і квадратних плакетках.

мірних значеннях $J_2/J_1 \in (0.91, 2)$. Нарешті, основний стан спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга є повністю фрагментованим мономер-тетрамерним станом (7.7), якщо внутрішньоплакетний зв'язок принаймні вдвічі сильніший, ніж мономер-плакетна взаємодія $J_2/J_1 > 2$.

Цілком зрозуміло, що три квантові феримагнітні основні стани, пов'язані з власними станами з найнижчою енергією ефективного змішаного спіну- $(1/2, 2)$, спіну- $(1/2, 2, 1/2, 1)$ і спіну- $(1/2, 1)$ ланцюжками Гайзенберга повинні проявлятися на кривих намагніченості при нульовій температурі як проміжні плато на $3/5$, $2/5$ і $1/5$ намагніченості насичення відповідно. Крім того, синглетний тетрамер-гексамерний (7.28) основний стан відповідає за плато нульової намагніченості, тоді як мономер-тетрамерний стан (7.7) дає інше плато $1/5$ через повну поляризацію мономерних спінів. Загальна фазова діаграма основного стану спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга, яка пояснює вплив зовнішнього магнітного поля, зображена на рис. 7.5 у площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Очевидно, що сильно фрустрована область параметрів $J_2/J_1 > 2$ фазової діаграми основного стану повністю узгоджується зі строгими теоретичними результатами для мономер-тетрамерного стану (7.7) і стану локалізованих магнітів (7.13), отриманих вище, використовуючи варіаційну процедуру та підхід локалізованих магнітів. Крім того, можна виявити, що проміжне $3/5$ -плато з одним магнітом, захопленим на кожній квадратній плакетці, альтернативно можна інтерпретувати як насичений стан ефективного феримагнітного змішаного спіну- $(1/2, 1)$ ланцюжка Гайзенберга.

З іншого боку, фазова діаграма основного стану спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга є набагато складнішою в області параметрів $J_2/J_1 < 2$ через

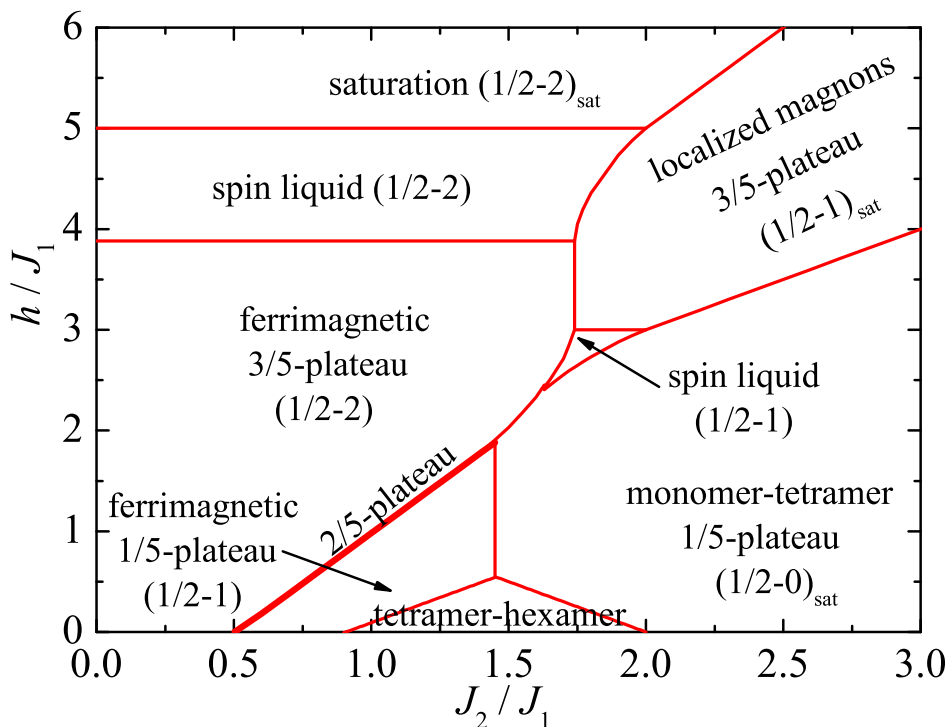


Рис. 7.5. Фазова діаграма основного стану спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга в площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Товста лінія схематично показує квантовий феримагнітний основний стан, який походить від ефективного змішаного спінового $(1/2, 2, 1/2, 1)$ ланцюжка Гайзенберга і є стабільним у дуже вузький інтервал магнітних полів.

наявність двох різних основних станів спінової рідини з короткосяжними кореляціями, але без будь-якої спонтанно порушеної симетрії [376–378]. Якщо відносне значення взаємодій достатньо слабке, тобто $J_2/J_1 < 0.5$, основний стан спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга повністю впливає з власних станів з найнижчою енергією (7.25) ефективного змішаного спіну- $(1/2, 2)$ ланцюжка Гайзенберга. Тому, проміжне 3/5-плато феримагнітного $(1/2 - 2)$ стану Ліба-Матіса руйнується в керованій полем квантовій критичній точці до стану безцілинної спінової рідини $(1/2 - 2)$. Подібний сценарій можна виявити в просторі параметрів $J_2/J_1 \in (0.50, 0.52)$, за винятком того, що крихітне плато 2/5 виникає при досить низьких магнітних полях через квантовий феримагнітний $(1/2 - 2 - 1/2 - 1)$ основний стан, що походить від власного стану з найнижчою енергією (7.27) ефективного змішаного спіну- $(1/2, 2, 1/2, 1)$ ланцюжка Гайзенберга. В області параметрів $J_2/J_1 \in (0.52, 0.91)$ основний феримагнітний стан Ліба-Матіса $(1/2 - 1)$, що виникає внаслідок ефективного змішаного спіну- $(1/2, 1)$ ланцюжка Гайзен-

берга відповідає за додаткове $1/5$ -плато при досить низьких магнітних полях. І останнє, але не менш важливе: плато нульової намагніченості, що відображає синглетний тетрамер-гексамерний основний стан (7.28), виникає при помірних значеннях констант взаємодій $J_2/J_1 \in (0.91, 2)$. У межах цієї області параметрів плато $1/5$, що виникає над плато нульової намагніченості, відповідає або квантовому феримагнетику Ліба-Матіса ($1/2 - 1$), або мономер-тетрамерній фазі (7.7) залежно від того, чи є відношення взаємодій меншим або більшим за порогове значення $J_2/J_1 = 1.45$. Аналогічно, проміжне $3/5$ -плато виникає або через квантовий феримагнетик Ліба-Матіса ($1/2 - 2$), або через локалізований магнонний основний стан (7.13) залежно від того, чи відношення взаємодій менше або більше за порогове значення $J_2/J_1 \approx 1.74$. Нарешті, ще один безщільний основний стан спінової рідини ($1/2 - 1$) можна знайти в області параметрів $J_2/J_1 \in (1.63, 2)$ і $h/J_1 \lesssim 3$ як власний стан з найнижчою енергією ефективного змішаного спін- $(1/2, 1)$ ланцюжка Гайзенберга. Варто зауважити, що всі показані границі фаз представляють квантові фазові переходи першого роду, за винятком трьох горизонтальних меж, пов'язаних із неперервними квантовими фазовими переходами другого роду.

Щоб проілюструвати велику різноманітність можливих сценаріїв процесу намагнічення спін- $1/2$ октаедричного ланцюжка Гайзенберга, на рис. 7.6 зображено кілька типових прикладів кривих намагнічення при нульовій температурі. Показані криві намагніченості підтверджують справедливість встановленої фазової діаграми основного стану. Крива намагніченості, показана на рис. 7.6(a), демонструє два квантові фазові переходи другого роду на границі проміжного $3/5$ -плато. Крива намагніченості, зображена на рис. 7.6(b), підтверджує зростання $1/5$ - і $2/5$ -плато, яке досягається при невеликому збільшенні J_2/J_1 . Виникнення плато нульової намагніченості внаслідок основного стану синглетного тетрамер-гексамера (7.28) можна побачити на кривій намагніченості, показаній на рис. 7.6(c). Крім того, рис. 7.6(d) ілюструє криву намагніченості зі зміною характеру $1/5$ -плато, а також зникнення вузького $2/5$ -плато. Крива намагніченості, зображена на рис. 7.6(e), демонструє зміну характеру плато $3/5$, а також два стрибки намагніченості, що виникають до основних станів спінової рідини.

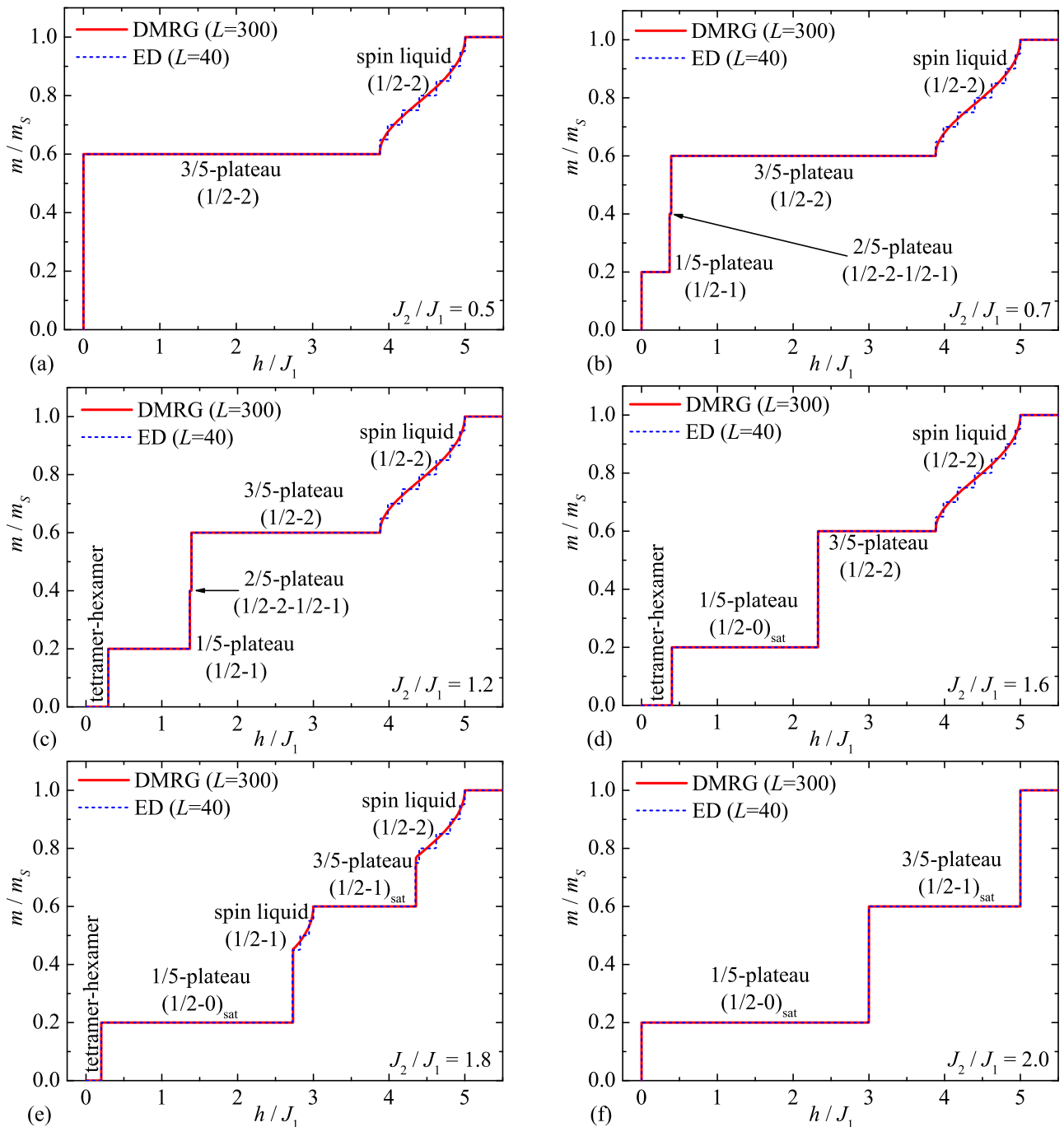


Рис. 7.6. Кілька типових кривих намагніченості при $T = 0$ для спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга. Товсті суцільні лінії показують числові результати, отримані в рамках методу DMRG для ланцюжків скінченного розміру $L = 300$ спінів ($N = 60$ елементарних комірок), а тонкі переривчасті лінії ілюструють числові результати точної діагоналізації для ланцюжків скінченного розміру $L = 40$ спінів ($N = 8$ елементарних комірок), покладаючи шість різних значень співвідношення взаємодії: (a) $J_2/J_1 = 0.5$; (b) $J_2/J_1 = 0.7$; (c) $J_2/J_1 = 1.2$; (d) $J_2/J_1 = 1.6$; (e) $J_2/J_1 = 1.8$; (f) $J_2/J_1 = 2.0$.

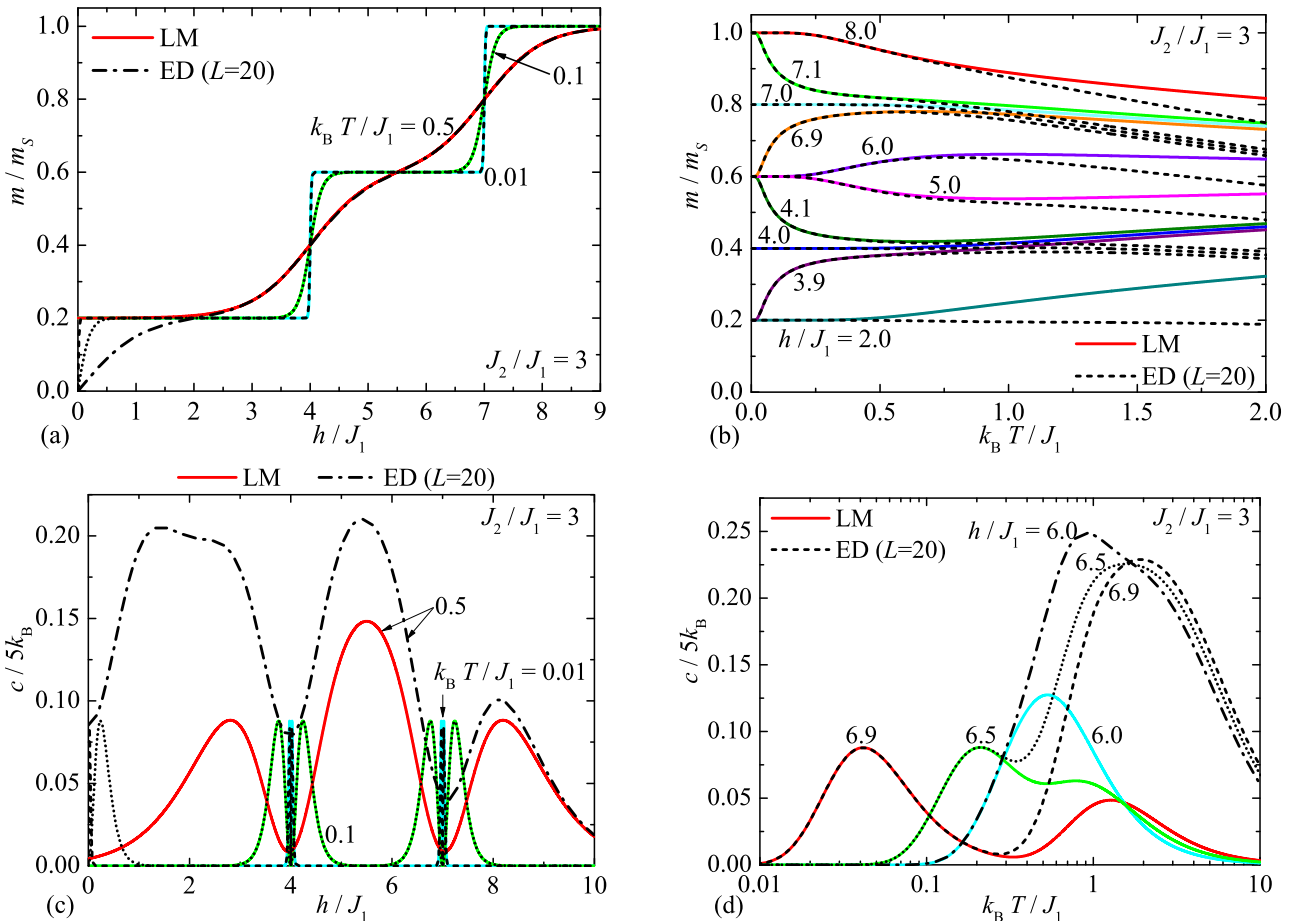


Рис. 7.7. Намагніченість (верхня панель) і питома теплоємність (нижня панель) спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга як функція магнітного поля та температури для фіксованого значення співвідношення взаємодії $J_2/J_1 = 3$. Суцільні лінії впливають з рівнянь (7.17) та (7.18), отримані за допомогою підходу локалізованих магнонів, тоді як ламані лінії різних стилів ілюструють дані повної точної діагоналізації для ланцюжка скінченного розміру $L = 20$ спінів ($N = 4$ елементарних комірок).

Нарешті, рис. 7.6(f) показує типову криву намагніченості в сильно фрустрованій області $J_2/J_1 > 2$, яка включає три різкі стрибки намагніченості.

Далі перейдемо до обговорення найцікавіших результатів для низькотемпературної термодинаміки спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга, отримані в рамках підходу локалізованих магнонів [36]. Варто, однак, нагадати, що теорія локалізованих магнонів дає прийнятні результати лише в області параметрів із сильною фрустрацією $J_2/J_1 > 2$, де багатомагнонні стани побудовані з однамагнонного з найнижчою енергією (7.12) і двомагнонні (7.6) локалізовані стани є суттєві для адекватного опису низькотемпературної термодинаміки.

Для порівняння намагніченість і питома теплоємність спін-1/2 октаедричного ланцюжка Гайзенберга, отримані за допомогою підходу локалізованих магнонів, зображені на рис. 7.7 разом із аналогічними даними для ланцюжка з $L = 20$ спінів, отриманими в рамках методу повної точної діагоналізації. Спочатку підкреслимо дві цікаві особливості, а саме (i) додатковий низькотемпературний пік питомої теплоємності для магнітних полів трохи нижчий за поле насичення, див. рис. 7.7(d) та (ii) помітне збільшення намагніченості зі зростанням температури для $h/J_1 = 3.9$ і 6.9 , див. рис. 7.7(b). Обидві особливості пов'язані з плоскими зонами в одномагнетонних збудженнях, див. рис. 7.3.

З рис. 7.7 можна зрозуміти, що теорія локалізованих магнонів забезпечує достовірний опис низькотемпературної намагніченості та термодинаміки, коли зовнішнє магнітне поле змінюється вище середньої точки найнижчого проміжного 1/5-плато, що виникає через мономер-тетрамерний основний стан (7.7). За цих умов намагніченість, розрахована згідно з рівнянням (7.17) демонструє для $J_2/J_1 = 3$ ідеальну згоду з даними точної діагоналізації за припущення, що температура $k_B T/J_1 \lesssim 0.5$. Порівняно з цим, отримана формула (7.18) для питомої теплоємності дає надійний опис числових даних точної діагоналізації для того самого значення співвідношення взаємодії $J_2/J_1 = 3$ лише для набагато нижчих температур $k_B T/J_1 \lesssim 0.2$. Однак слід зазначити, що висота та положення низькотемпературного максимуму теплоємності знаходиться в чудовій згоді з числовими даними точної діагоналізації за умови, що магнітне поле фіксується досить близько до поля насичення або переходу, керованого полем між 1/5- і 3/5-плато.

7.1.2. Кластеризовані фази Голдейна у змішаному октаедричному ланцюжку

У попередньому підрозділі виявлено, що спін-1/2 октаедричний ланцюжок демонструє цілий ряд дробових плато намагніченості. Варто зауважити, що проміжні плато намагніченості, які виникають у процесі намагнічення квантових антиферромагнетиків Гайзенберга, можуть відповідати екзотичним квантовим фазам

різноманітного характеру і вони можуть виникати при різних дробових значеннях намагніченості насичення [7, 88, 125]. Грунтуючись на ОУА критерії квантування дробових плато (розглянутого у підрозділі 1.1), бачимо, що чим вищий період основного стану, тим більша кількість доступних плато намагніченості. Розглянутий у розділі 6 спін-1/2 ортогонально-димерний ланцюжок Гайзенберга [120, 121] є рідкісним прикладом квантового спінового ланцюжка, який демонструє на кривій намагніченості при нульовій температурі особливу послідовність нескінченної кількості дробових плато намагніченості $\frac{\mathbb{Z}}{2(\mathbb{Z}+1)}$ (\mathbb{Z} — набір цілих чисел), що є прямим наслідком фрагментації основного магнітного стану. Фрагментація, спричинена локальним утворенням синглетів, може також відповідати за виникнення кластерних фаз типу Голдейна, як спочатку повідомлялося для ромбічного ланцюжка Гайзенберга [99, 103, 379]. Нещодавнє експериментальне відкриття кластерних фаз типу Голдейна в мінералах федотовіт $\text{K}_2\text{Cu}_3\text{O}(\text{SO}_4)_3$ [380], еухлорин $\text{KNaCu}_3\text{O}(\text{SO}_4)_3$ і пунініт $\text{Na}_2\text{Cu}_3\text{O}(\text{SO}_4)_3$ [381] стимулювало відновлений інтерес до пошуку інших квантових спінових ланцюжків, які демонструють імовірний кластерний тип Голдейна в основних станах [382, 383]. Інші екзотичні квантові основні стани, які проявляються на кривій намагніченості при нульовій температурі як проміжні плато намагніченості, що виникають трохи нижче поля насичення, можуть мати характер зв'язаних магнонних кристалів. Варто зазначити, що локалізована природа зв'язаних магнонів у магнонокристалічних фазах дає змогу описувати криві низькотемпературної намагніченості на основі відповідності відображення з класичними моделями ґраткового газу (Ізинґа) [373, 374].

Тут розглядається змішаний октаедричний ланцюжок Гайзенберга зі спіном-1 і спіном-1/2 в магнітному полі, який задається таким гамільтоніаном

$$\hat{\mathcal{H}} = \sum_{j=1}^N \left[J_1 (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot (\hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}) + J_2 (\hat{\mathbf{S}}_{2,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{5,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{2,j}) - h \sum_{i=1}^5 \hat{S}_{i,j}^z \right], \quad (7.29)$$

де $\hat{\mathbf{S}}_{i,j} \equiv (\hat{S}_{i,j}^x, \hat{S}_{i,j}^y, \hat{S}_{i,j}^z)$ позначає компоненти спін-1 (спін-1/2) операторів для ін-

дексу елементарної комірки $i = 1$ ($i = 2, 3, 4, 5$) відповідно. Обмінна взаємодія $J_1 > 0$ враховує антиферромагнітну мономер-плакетну взаємодію між найближчими сусідніми частинками зі спіном 1 та спіном $1/2$, тоді як константа взаємодії $J_2 > 0$ враховує антиферромагнітну взаємодію всередині плакеток між найближчими сусідніми частинками зі спіном $1/2$ з однієї квадратної плакетки. Останній доданок у гамільтоніані (7.29) представляє стандартний член Зеємана для магнітних моментів у зовнішньому магнітному полі $h \geq 0$. Для простоти покладемо періодичні граничні умови $\mathbf{S}_{1,N+1} \equiv \mathbf{S}_{1,1}$.

Ми розглядаємо модель (7.29), використовуючи варіаційний підхід та метод локалізованих магнонів висвітлені вище. Зупинимось на описі октаедричного ланцюжка як ефективної моделі змішаних спінів. Гамільтоніан (7.29) змішаного октаедричного ланцюжка Гайзенберга зі спіном 1 і $1/2$ можна повторно виразити через оператор композитного спіну квадратної плакетки $\hat{\mathbf{S}}_{\square,j} = \hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}$ та складені оператори спіну $\hat{\mathbf{S}}_{24,j} = \hat{\mathbf{S}}_{2,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,j}$, $\hat{\mathbf{S}}_{35,j} = \hat{\mathbf{S}}_{3,j} + \hat{\mathbf{S}}_{5,j}$ двох пар спінів із протилежних кутів квадратної пластинки

$$\hat{\mathcal{H}} = J_1 \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{1,j} + \hat{\mathbf{S}}_{1,j+1}) \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\square,j} - h \sum_{j=1}^N (\hat{S}_{1,j}^z + \hat{S}_{\square,j}^z) + \frac{J_2}{2} \sum_{j=1}^N (\hat{\mathbf{S}}_{\square,j}^2 - \hat{\mathbf{S}}_{24,j}^2 - \hat{\mathbf{S}}_{35,j}^2). \quad (7.30)$$

Як і у випадку спін- $1/2$ ланцюжка розглянутого на початку цього розділу, композитні спіни $\hat{\mathbf{S}}_{\square,j}$, $\hat{\mathbf{S}}_{24,j}$, $\hat{\mathbf{S}}_{35,j}$ є локально збережувані величини з чітко визначеними квантовими спіновими числами, тому основний стан змішаного спін- $(1, 1/2)$ октаедричного ланцюжка Гайзенберга можна відповідно знайти за власними станами з найнижчою енергією ефективного змішаного спін- $(S_{1,j}, S_{\square,j})$ ланцюжка Гайзенберга (7.30) при конкретному виборі квантових спінових чисел $S_{\square,j}$, $S_{24,j}$ і $S_{35,j}$. Повний спін на квадратній плакетці може приймати три різні значення $S_{\square,j} = 0, 1$ і 2 , тоді як перше значення $S_{\square,j} = 0$, яке стосується синглет-тетрамерного стану, відповідає за фрагментацію ефективних ланцюжків Гайзенберга зі змішаним спіном. Власні стани з найнижчою енергією ефективних ланцюжків Гайзенберга зі змішаними спінами- $(S_{1,j}, S_{\square,j})$, які включають синглетний стан $S_{\square,j} = 0$ на плакетках у періодичних позиціях, можна легко обчислити за допомогою точної

аналітичної або числової діагоналізації менших спінових кластерів Гайзенберга. У випадку довших кластерів можна вдатися до методу DMRG, щоб отримати власні стани з найнижчою енергією ефективного змішаного спін- $(S_{1,j}, S_{\square,j})$ ланцюжка Гайзенберга у випадку ненульових квантових чисел $S_{\square,j} = 1, 2$. Адаптувавши підпрограми з пакету ALPS [384], ми виконали моделювання DMRG для кількох ефективних спін- $(S_{1,j}, S_{\square,j})$ ланцюжків Гайзенберга з періодом трансляції менше чотирьох і загальна кількість спінів 120, що еквівалентно великомасштабному моделюванню DMRG змішаного спін- $(1,1/2)$ октаедричного ланцюжка Гайзенберга із загальним числом спінів 300.

Тут ми зосередимось на найцікавіших результатах отриманих для основного стану і кривих намагніченості моделі. Загальна фазова діаграма основного стану моделі (7.29) зображена на рис. 7.8 у площині $J_2/J_1 - h/J_1$, отримана за допомогою DMRG симуляцій ефективних змішаних спін- $(S_{1,j}, S_{\square,j})$ ланцюжків Гайзенберга, доповнених точними розрахунками. Виявляється, що такий квантовий спіновий ланцюжок вже демонструє багато екзотичних квантових фаз при нульовому магнітному полі. При відносно малих значеннях співвідношення взаємодії $J_2/J_1 < 1.018$ основним станом змішаного октаедричного ланцюжка Гайзенберга зі спіном-1 і спіном-1/2 є феримагнітна фаза Ліба-Матіса, яка походить від ефективного змішаного спін- $(1, 2)$ ланцюжка Гайзенберга [375] з максимально можливим значенням складеного спіну $S_{\square,j} = 2$ на всіх квадратних плакетках. Іншу феримагнітну фазу з подвоєним періодом елементарної магнітної комірки ($p = 2$) можна знайти лише у відносно вузькому інтервалі простору параметрів $J_2/J_1 \in (1.018, 1.073)$. Цей основний стан впливає з власного стану з найнижчою енергією ефективного змішаного спін- $(1, 1, 1, 2)$ ланцюжка Гайзенберга з регулярним чергуванням триплетів ($S_{\square,j} = 1$) і квінтетів ($S_{\square,j} = 2$) на непарних і парних квадратних плакетках (або навпаки). Цей основний стан також належить до класу феримагнітних станів Ліба-Матіса.

Однорідна фаза Голдейна являє собою точний основний стан в області параметрів $J_2/J_1 \in (1.073, 2.577)$, і цей основний стан походить від власного стану з найнижчою енергією ефективного спін- $(1,1)$ ланцюжка Гайзенберга з ком-

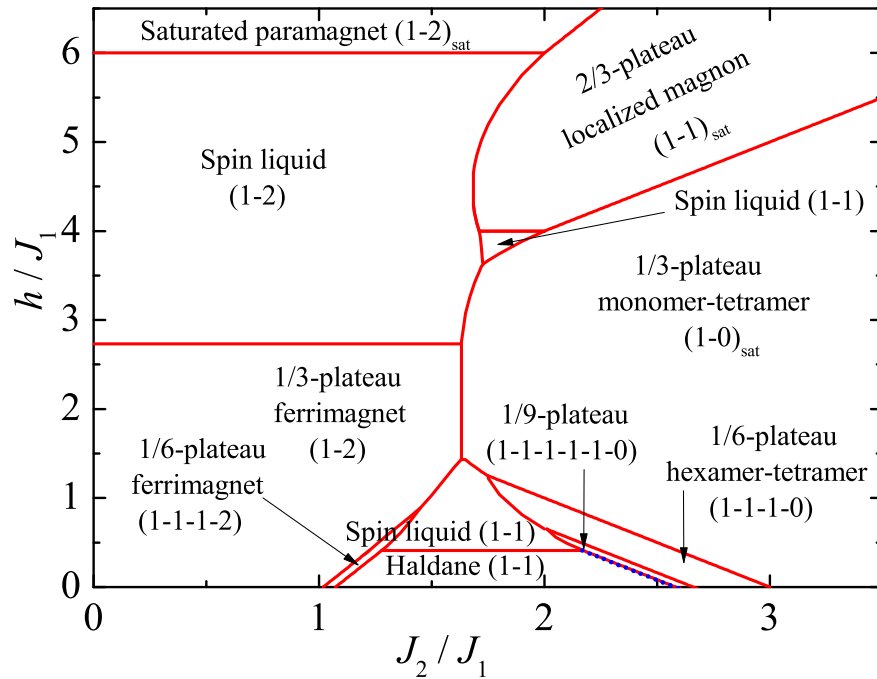


Рис. 7.8. Фазова діаграма основного стану змішаного спін-(1,1/2) октаедричного ланцюжка Гайзенберга у площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Пунктирна лінія обмежує межу фаз, уздовж якої у вузькому діапазоні магнітних полів з'являється крихітне плато в одну дванадцятку, пов'язане з кластерною фазою Голдейна з $p = 4$. Числа в дужках визначають загальний spin мономерних вузлів і квадратних плакеток у магнітній елементарній комірці даного основного стану.

позитним спіном $S_{\square,j} = 1$ на всіх квадратних плакетках. Найцікавіше, що у відносно вузькому діапазоні співвідношення взаємодії $J_2/J_1 \in (2.577, 2.583)$ і $J_2/J_1 \in (2.583, 2.660)$ зустрічаються дві споріднені кластерні фази Голдейна, які мають вищий період магнітної елементарної комірки $p = 4$ і $p = 3$ відповідно. На відміну від однорідної фази Голдейна, фрагментовані кластерні фази Голдейна порушують трансляційну симетрію через періодичне повторення синглетного стану плакетки $S_{\square,j} = 0$, що розбиває октаедричний ланцюжок на менші фрагменти. Слід зазначити, що стійкість фрагментованих кластерних фаз Голдейна обернено пропорційна періоду магнітної елементарної комірки p . Насправді гексамер-тетрамерний стан із регулярним чергуванням триплетних гексамерів і синглетних тетрамерів, як останній член цієї множини з певним періодом $p = 2$, поширюється на значно ширший інтервал параметрів $J_2/J_1 \in (2.660, 3)$, ніж інші

дві фрагментовані кластерні фази Голдейна разом. Гексамер-тетрамерний стан походить від ефективного змішаного спіну- $(1, 1, 1, 0)$ ланцюжка Гайзенберга з регулярним чергуванням композитного триплету ($S_{\square,j} = 1$) і синглету ($S_{\square,j} = 0$) на непарних і парних плакетках (або навпаки). Мономер-тетрамерний основний стан (7.58) із композитним синглетним станом $S_{\square,j} = 0$ на всіх плакетках виникає в області параметрів із сильною фрустрацією $J_2/J_1 > 3$. Мономерні частинки зі спіном-1 стають у межах цього основного стану (7.58) парамагнітними через відсутність спін-спінових кореляцій за межами синглет-тетрамерної фази.

Нетипові кластерні фази Голдейна для кращої ілюстрації схематично зображені на рис. 7.9 разом із мономерно-тетрамерною та однорідною фазами Голдейна. Заштриховані овали представляють найнижчий енергетичний триплетний стан спін-1 ланцюжка Гайзенберга скінченного розміру за умови відкритих граничних умов як основного спінового кластера, який ізольований з обох сторін через синглет-плакетний стан. Слід зазначити, що лише три кластерні фази Голдейна з магнітним періодом $p = 2, 3$ і 4 можуть представляти справжні основні стани змішаного октаедричного ланцюжка Гайзенберга (7.29). Цей результат різко контрастує з безмежним рядом основних станів, викликаних фрагментацією, які виникають у спін- $1/2$ ортогонально-димерному ланцюжку Гайзенберга [120, 121]. Якщо точніше, то гексамер-тетрамерний основний стан як найпростіший представник кластерної фази Голдейна з магнітним періодом $p = 2$ відповідає регулярному чергуванню синглетних плакеток та октаедричних (гексамерних) триплетів [див. рис. 7.9(b)]. Крім того, триплетний стан змішаного спін- $(1-1/2)$ октаедра Гайзенберга (рис. 7.28), що виникає в гексамер-тетрамерній фазі, цілком аналогічний кластерному стану Голдейна, нещодавно виявленому для мінералу федотовіту [380].

Далі наша увага буде зосереджена на аналізі основного стану при скінчених магнітних полях. Спочатку ми розглянемо значення намагніченості всіх вищезгаданих основних станів нульового поля. Два квантові феримагнітні основні стани, пов'язані з власними станами з найнижчою енергією ефективного змішаного спін- $(1, 2)$ і спін- $(1, 1, 1, 2)$ ланцюжків Гайзенберга, повинні проявлятися на

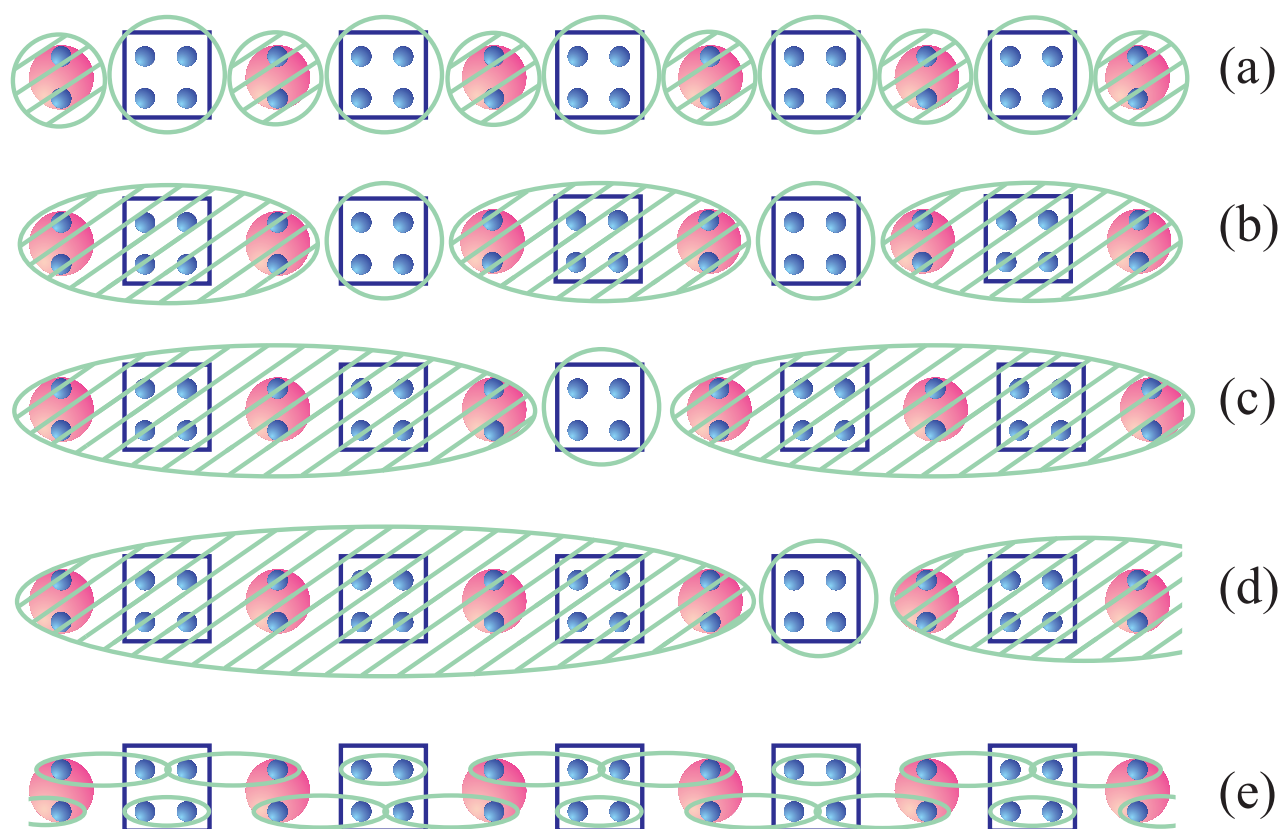


Рис. 7.9. Схематичне зображення: (а) мономер-тетрамерної фази; (б) гексамер-тетрамерної фази як найпростішого кластерного стану Голдейна з періодом $p = 2$; (с)-(д) фрагментовані кластерні стани Голдейна з періодом $p = 3$ і 4 ; (е) однорідний стан Голдейна. Суцільні овали та кружечки позначають синглет-димерні та синглет-тетрамерні стани відповідно, тоді як заштриховані кола та овали позначають триpletні стани даного кластера.

кривих намагніченості при нульовій температурі як проміжні плато на одній третині та одній шостій намагніченості насичення відповідно. Навпаки, однорідна фаза Голдейна повинна відповідати за плато нульової намагніченості, тоді як три фрагментовані кластерні фази Голдейна з періодом $p = 2, 3$ і 4 спричиняють $1/6$, $1/9$ та $1/12$ дробові плато, відповідно. Мономер-тетрамерний (7.58) основний стан забезпечує плато $1/3$, яке виникає виключно внаслідок повної поляризації спін-1 мономера.

Фазова діаграма основного стану, зображена на рис. 7.8, стає складнішою в менш фрустрованому просторі параметрів $J_2/J_1 < 3$ з огляду на існування трьох областей квантової спінової рідини, дві з яких походять від ефективного спін-(1,1) ланцюжка Гайзенберга і третій є результатом ефективного змішаного спін-(1,2) ланцюжка Гайзенберга. Основний стан вихідної моделі походить виключно від власних станів з найнижчою енергією ефективного змішаного спін-(1,2) ланцюжка Гайзенберга, коли відношення взаємодій слабше ніж $J_2/J_1 < 1.018$. Проміжне плато $1/3$, пов'язане з феримагнітною фазою Ліба-Матіса, відповідно, завершується на індукованому полем квантовому фазовому переході до безцілинного основного стану квантової спінової рідини, що виникає в критичному полі $h_c/J = 2.733$ [рис. 7.10(a)]. Якщо відношення взаємодій знаходиться в інтервалі $J_2/J_1 \in (1.018, 1.073)$, можна отримати аналогічну криву намагніченості при нульовій температурі лише з одним винятком, а саме критичним плато $1/6$, що стосується феримагнітної фази з подвоєним періодом елементарної магнітної комірки, яка виникає раніше за ширше плато $1/3$.

Плато нульової намагніченості, пов'язане з однорідною фазою Голдейна, виникає, коли співвідношення взаємодії вибрано з інтервалу $J_2/J_1 \in (1.073, 2.577)$, див. рис. 7.10(b)-(f). Однорідна фаза Голдейна або руйнується під час квантового фазового переходу першого роду, керованого полем, до феримагнітної фази з подвоєним періодом ($1/6$ плато), або квантового фазового переходу другого роду, керованого полем, до квантової спінової рідини [див. рис. 7.10(b)-(e)] або фазовий перехід першого роду, керований полем, до фрагментованої кластерної фази Голдейна з періодом $p = 4$, що відповідає $1/12$ плато [див. рис. 7.10(f)].

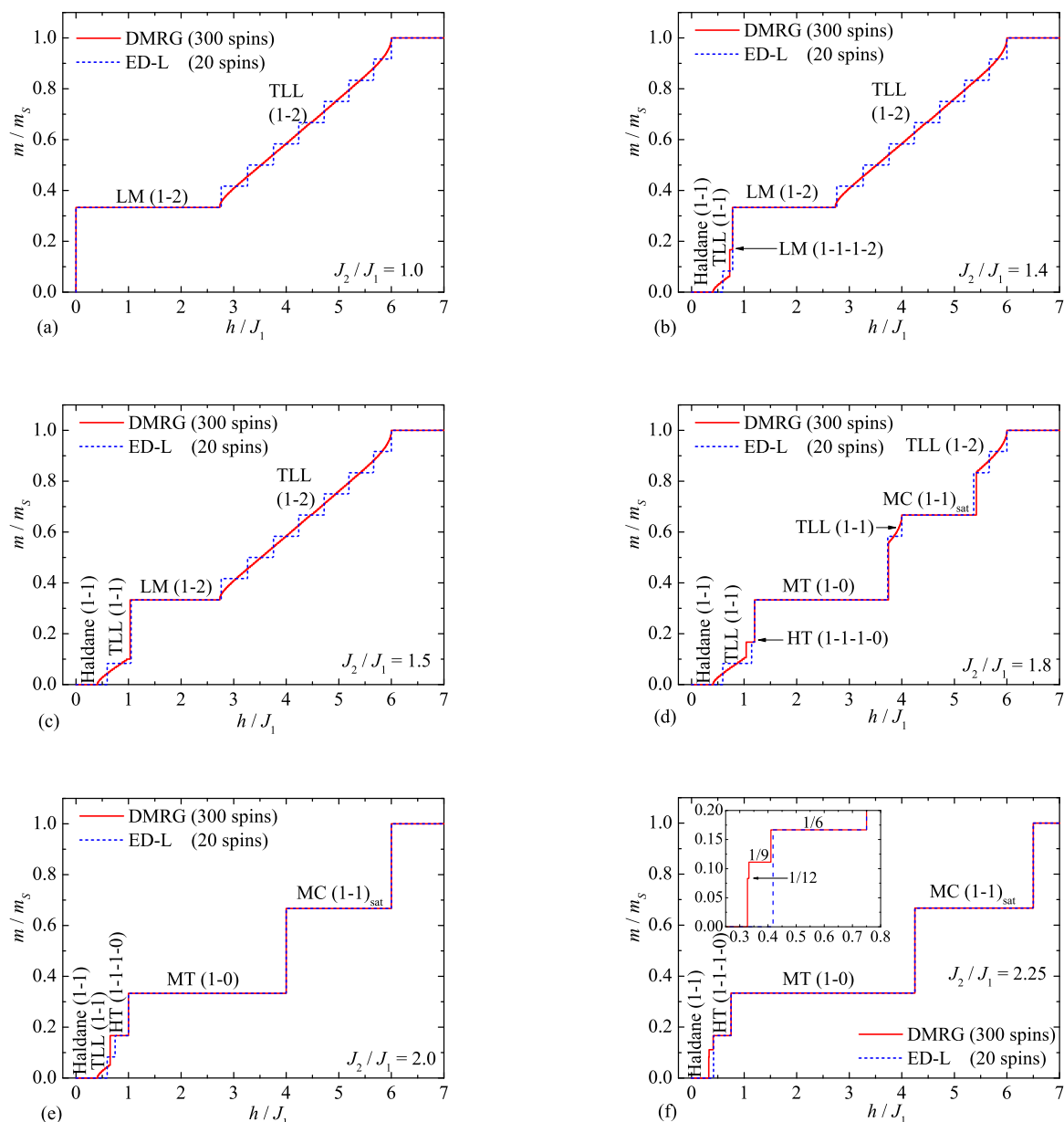


Рис. 7.10. Криві намагніченості при $T = 0$ змішаного зі спін- $(1,1/2)$ октаедрично-го ланцюжка Гайзенберга. Суцільні лінії відображають моделювання DMRG ефективних ланцюжків Гайзенберга (7.30), які складаються з $N = 60$ елементарних комірок (що відповідає 300 спінам), тоді як пунктирні лінії відображають дані точної діагоналізації $N = 4$ елементарних комірок (20 спінів). Криві намагніченості відповідають шести обраним значенням J_2/J_1 : (a) $J_2/J_1 = 1.0$; (b) $J_2/J_1 = 1.2$; (c) $J_2/J_1 = 1.4$; (d) $J_2/J_1 = 1.5$; (e) $J_2/J_1 = 2.0$; (f) $J_2/J_1 = 2.25$. Вставка на рис. 7.10(f) показує у збільшеному масштабі область параметрів, де з'являються два крихітних $1/9$ та $1/12$ плато через кластерні фази Голдейна з періодом $p = 3$ і 4.

Слід зазначити, що мікроскопічна природа широкого плато $1/3$ в основному залежить від того, чи відношення взаємодій менше або більше за $J_2/J_1 = 1.631$. У першому випадку $J_2/J_1 < 1.631$ верхнє критичне поле $1/3$ плато типу Ліба-Матіса, не залежить від коефіцієнта J_2/J_1 , тоді як верхнє критичне поле $1/3$ плато типу мономер-тетрамерної фази (7.58), монотонно зростає в бік більшого магнітного поля при збільшенні J_2/J_1 [порівняйте рис. 7.10(a)-(c) з рис. 7.10(d)]. Завдяки цьому область магнітного поля, притаманна квантовій спіновій рідині ефективного змішаного спін-(1,2) ланцюжка Гайзенберга суттєво зменшується, коли $J_2/J_1 > 1.631$. Інша квантова спінова рідина, що виникає з ефективного спін-(1,1) ланцюжка Гайзенберга, демонструє особливу поведінку типу повторного входу [див. рис. 7.10(d)].

Крива намагніченості при нульовій температурі включає $2/3$ плато, притаманне зв'язаній магнонокристалічній фазі (7.13), коли $J_2/J_1 > 1.685$. Зв'язана магнонокристалічна фаза або затиснута між двома областями квантової спінової рідини [див. рис. 7.10(d)], або з'являється через стрибок намагніченості з $1/3$ плато, що відповідає мономер-тетрамерній фазі [див. рис. 7.10(e) і (f)]. Слід зазначити, що проміжне $2/3$ плато через магнонокристалічний стан (7.13) з одним магноном на кожній квадратній плакетці, можна з іншого боку інтерпретувати як насичений стан ефективного спін-(1,1) ланцюжка Гайзенберга.

7.2. Квантова спінова модель на квадратній ґратці декорованій ромбами

Одновимірні декоровані моделі досліджені в попередньому підрозділі 7.1 демонструють складну структуру основного стану, яка не є стійкою щодо температурних флуктуацій. Двовимірні моделі розглянуті далі демонструють також ряд температурних фазових переходів неможливих для раніше розглянутих моделей.

Далі розглянемо спін- $1/2$ антиферромагнетик Гайзенберга в магнітному полі на квадратній ґратці, декорованій ромбами. Ґратка схематично показана на

рис. 1.1, а гамільтоніан моделі визначається як

$$\begin{aligned}
 H = & J_1 \sum_{i=1}^N \left[\mathbf{S}_{i,1} \cdot \left(\mathbf{S}_{i,2} + \mathbf{S}_{i,3} + \mathbf{S}_{i,4} + \mathbf{S}_{i,5} + \mathbf{S}_{i-\hat{x},2} + \mathbf{S}_{i-\hat{x},3} + \mathbf{S}_{i-\hat{y},4} + \mathbf{S}_{i-\hat{y},5} \right) \right] \\
 & + J_2 \sum_{i=1}^N \left(\mathbf{S}_{i,2} \cdot \mathbf{S}_{i,3} + \mathbf{S}_{i,4} \cdot \mathbf{S}_{i,5} \right) - h \sum_{i=1}^N \sum_{\mu=1}^5 S_{i,\mu}^z, \quad (7.31)
 \end{aligned}$$

де $\mathbf{S}_{i,\mu} = (S_{i,\mu}^x, S_{i,\mu}^y, S_{i,\mu}^z)$ представляють спіні-1/2 оператори, які відповідають μ -му спіну в i -вій елементарній комірці. Позначимо відповідний вузол ґратки (i, μ) . 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 комірками та $N_s = 5N$ вузлами з періодичними граничними умовами. Як правило, ми використовуємо квадратні ґратки з $N = L^2$. Крім того, J_1 і J_2 — дві обмінні взаємодії, зображені на рис. 1.1 чорними та червоними лініями відповідно. Останній член у H відповідає енергії взаємодії спінів 1/2 із зовнішнім магнітним полем h .

Гамільтоніан (7.31) також можна виразити через композитні спіни на димерах $2N$. У кожній елементарній комірці i вертикальний димер утворений спінами $\mathbf{S}_{i,2}$ і $\mathbf{S}_{i,3}$, і тоді повний спін для цього димера d $\mathbf{S}_d = \mathbf{S}_{i,2} + \mathbf{S}_{i,3}$. Аналогічно, спіни $\mathbf{S}_{i,4}$ і $\mathbf{S}_{i,5}$ утворюють горизонтальний димер, і в цьому випадку $\mathbf{S}_d = \mathbf{S}_{i,4} + \mathbf{S}_{i,5}$. Усі повні спіни димерів представляють локально збережувані величини з чітко визначеними квантовими спіновими числами. Решта спінів $\mathbf{S}_{i,1}$ називають мономерними спінами. Тоді гамільтоніан (7.31) можна виразити у компактній формі:

$$H = J_1 \sum_{d=1}^{2N} \sum_{(i,1) \in \mathcal{N}_d} \mathbf{S}_d \cdot \mathbf{S}_{i,1} + \frac{J_2}{2} \sum_{d=1}^{2N} \left(\mathbf{S}_d^2 - \frac{3}{2} \right) - h \sum_{d=1}^{2N} S_d^z - h \sum_{i=1}^N S_{i,1}^z, \quad (7.32)$$

де сумування за d поширюється на всі $2N$ димери, а внутрішня сума першого доданку поширюється на два мономерні спіни $\mathbf{S}_{i,1}$, які є найближчими сусідами d -го димера (див. рис. 1.1), тобто вузол ґратки $(i, 1)$ є елементом множини двох найближчих сусідніх вузлів \mathcal{N}_d d -го димера. Точніше, для вертикального (горизонтального) димера, це два спіни мономера ліворуч і праворуч (верхній і нижній) від цього димера.

Перший доданок у гамільтоніані (7.32) відповідає змішаній спін- S_d і спін-1/2 моделі Гайзенберга на ґратці Ліба, тоді як другий забезпечує тривіальний зсув енергії залежно від квантового спінового числа S_d . Зауважимо, що композитні спіни на кожному димері можуть приймати два різні значення квантових спінових чисел $S_d = 0, 1$, при цьому значення $S_d = 0$ відповідає стану синглетного димера.

$$|s\rangle_d = \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow\rangle_d - |\downarrow\uparrow\rangle_d). \quad (7.33)$$

Це призводить до фрагментації ефективних моделей Гайзенберга зі змішаним спіном, отриманих з гамільтоніана (7.32) після розгляду всіх можливих комбінацій квантових спінових чисел S_d для всіх димерів. Отже, основний стан антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованій ромбами, можна пов'язати з власними станами найнижчої енергії ефективних моделей Гайзенберга (7.32), беручи до уваги всі доступні комбінації квантових спінових чисел S_d . Нижче ми спочатку представляємо наші методи, а потім досліджуємо розширену фазову діаграму основного стану гамільтоніана H , показану нижче на рис. 7.11.

7.2.1. Фазова діаграма моделі Гайзенберга

Спочатку розглянемо параметричний режим із домінантним димерним зв'язком J_2 , у якому ми можемо отримати точні аналітичні результати для основного стану. Точніше, для $J_2/J_1 > 2$ можна використати варіаційний принцип, щоб отримати точний основний стан H у нульовому полі [150]. Основна ідея цього підходу полягає в розкладі гамільтоніана на коміркові гамільтоніани $4N$ (цей розклад відрізняється від статті [150]):

$$H = \sum_{d=1}^{2N} \sum_{(i,1) \in \mathcal{N}_d} H_{d,i}, \quad (7.34)$$

де кожен комірковий гамільтоніан $H_{d,i}$ відповідає окремому трикутнику, який включає димер і один з двох найближчих мономерних спінів, а саме

$$H_{d,i} = \frac{J_2}{4} \left(\mathbf{S}_d^2 - \frac{3}{2} \right) + J_1 \mathbf{S}_{i,1} \cdot \mathbf{S}_d. \quad (7.35)$$

Важливо, що кожен димер d є частиною двох трикутників, що призводить до появи множника $1/2$ для димерних членів пропорційних до J_2 у $H_{d,i}$ у порівнянні з рівнянням (7.32).

Згідно варіаційного принципу [122, 372], енергія основного стану моделі обмежена знизу сумою найнижчих власних значень $\varepsilon_{d,i}^{(0)}$ коміркових гамільтоніанів (7.35),

$$E_0 = \langle \Psi_0 | H | \Psi_0 \rangle = \left\langle \Psi_0 \left| \sum_{d=1}^{2N} \sum_{(i,1) \in \mathcal{N}_d} H_{d,i} \right| \Psi_0 \right\rangle \geq \sum_{d=1}^{2N} \sum_{(i,1) \in \mathcal{N}_d} \varepsilon_{d,i}^{(0)}. \quad (7.36)$$

Спектр кожного коміркового гамільтоніана $H_{d,i}$ можна виразити у термінах квантових спінових чисел S_t і S_d асоційованих з композитними спіновими операторами $\mathbf{S}_t = \mathbf{S}_d + \mathbf{S}_{i,1}$ і \mathbf{S}_d , таким чином

$$\varepsilon_{d,i} = -\frac{3}{8}(J_1 + J_2) + \frac{J_1}{2}S_t(S_t + 1) + \left(\frac{J_2}{4} - \frac{J_1}{2}\right)S_d(S_d + 1). \quad (7.37)$$

Прямий розрахунок вказує на те, що для $h = 0$ власний стан із квантовими спіновими числами $S_t = 1/2$ і $S_d = 0$ представляє стан з найменшою енергією $H_{d,i}$, якщо $J_2/J_1 > 2$. Скінченне поле тоді просто поляризує мономерні спіни, якщо воно не перевищує критичного значення. Завдяки цьому факту загальний основний стан гамільтоніану та його енергія для $J_2/J_1 > 2$ у мономер-димерній (MD) фазі є такими

$$|\text{MD}\rangle = \begin{cases} \prod_{i=1}^N |\sigma\rangle_{i,1} \otimes \prod_{d=1}^{2N} |s\rangle_d, & \sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}, h = 0 \\ \prod_{i=1}^N |\uparrow\rangle_{i,1} \otimes \prod_{d=1}^{2N} |s\rangle_d, & h > 0 \end{cases}, \quad (7.38)$$

$$E_{\text{MD}}/N = -\frac{3}{2}J_2 - \frac{h}{2}. \quad (7.39)$$

Зауважимо, що MD фаза має виродження основного стану 2^N при $h = 0$, оскільки кожен з N мономерних спінів може однаково вилаштуватись у будь-якому з двох напрямків.

Умова стійкості MD фази при $h = 0$ ($J_2/J_1 > 2$) узгоджується з результатами, опублікованими раніше [152, 153]. Вони також підтвердили наявність іншого точного основного стану, який називають димер-тетрамерною (DT) фазою.

Основний стан ДТ включає стани синглетного димера $|s\rangle_d$ і стани синглетного тетрамера $|t\rangle_d$, які утворюються між димером d і двома сусідніми мономерними спінами, що позначаються $(i, 1)$ і $(i', 1)$:

$$\begin{aligned} |t\rangle_d = & \frac{1}{\sqrt{3}}(|\uparrow\rangle_{i,1}|\downarrow\rangle_d|\downarrow\rangle_{i',1} + |\downarrow\rangle_{i,1}|\uparrow\rangle_d|\uparrow\rangle_{i',1}) \\ & - \frac{1}{2}(|\uparrow\rangle_{i,1}|\uparrow\rangle_d|\downarrow\rangle_{i',1} + |\uparrow\rangle_{i,1}|\downarrow\rangle_d|\uparrow\rangle_{i',1} \\ & + |\downarrow\rangle_{i,1}|\uparrow\rangle_d|\downarrow\rangle_{i',1} + |\downarrow\rangle_{i,1}|\downarrow\rangle_d|\uparrow\rangle_{i',1}) . \end{aligned} \quad (7.40)$$

У ДТ фазі множина можливих основних станів відповідає найщільнішому упакуванню синглетних тетрамерів $|t\rangle_d$ на квадратній ґратці, декорованій ромбами, при цьому їх там не можливо розмістити більше ніж $N/2$ $|t\rangle_d$ (решта незайнятих димерів перебувають в стані синглетних димерів $|s\rangle_d$). Таким чином, енергія основного стану в ДТ фазі визначається як

$$E_{\text{ДТ}}/N = \frac{3}{2}\varepsilon_s + \frac{1}{2}\varepsilon_t. \quad (7.41)$$

Тут $\varepsilon_s = -\frac{3}{4}J_2$ стосується енергії синглет-димерного стану $|s\rangle_d$, а $\varepsilon_t = -2J_1 + \frac{J_2}{4}$ позначає енергію синглет-тетрамерного стану $|t\rangle_d$. Щоб отримати реальні області стійкості цих двох фаз для скінченних полів, а також інших фаз на повній фазовій діаграмі ми використали числові методи DMRG та точної діагоналізації.

Фазову діаграму основного стану у нульовому полі $h = 0$ отримано у попередніх роботах [151–153], вона містить три окремі фази – LM, ДТ і MD, залежно від співвідношення взаємодій J_2/J_1 , (див. рис. 1.2 та підрозділ 1.1). У LM фазі енергія основного стану мінімізується за рахунок того, що всі спінові димери знаходяться в триплетному стані, тоді як спіни мономерів орієнтовані переважно протилежно до них. Квантова природа феримагнітного стану LM добре помітна через квантову редукцію локальних намагніченостей мономерних та димерних спінів, як показано на рис. 7.12. У той час як квантові флуктуації зменшують намагніченість мономерних спінів приблизно на 20%, зменшення намагніченості димерних спінів лише приблизно на 5%. Згідно з теоремою Ліба-Матіса, обидві локальні намагніченості узгоджуються із загальною намагніченістю на вузол $M/M_S = 3/5$

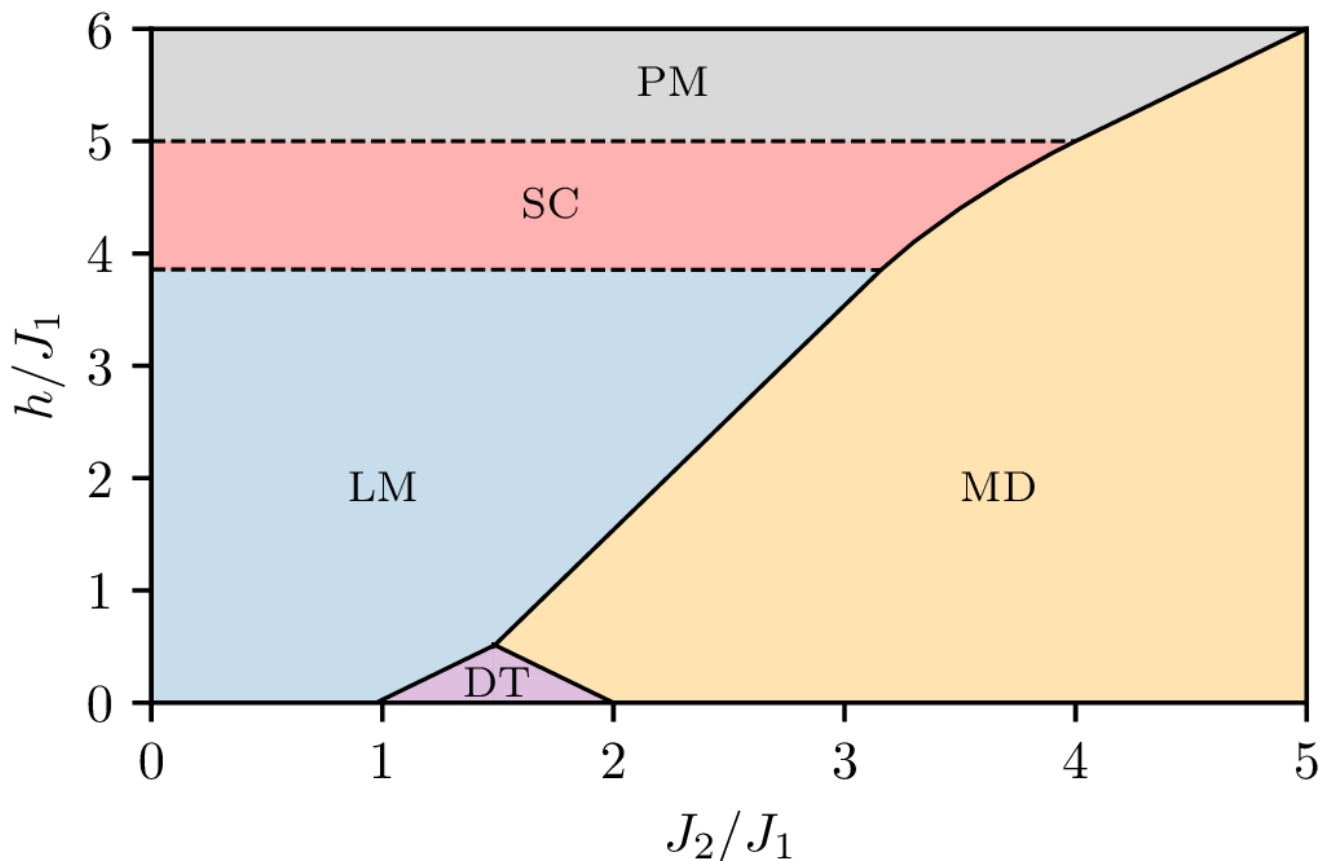


Рис. 7.11. Фазова діаграма основного стану спін-1/2 антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованій ромбами у площині $J_2/J_1 - h/J_1$, що містить фази Ліба-Матіса (LM) і скінсних спінів (SC), а також димер-тетрамерну (DT), мономер-димерну (MD), насичену парамагнітну (PM) фази. Штриховими (суцільними) лініями позначені квантові фазові переходи другого (першого) роду.

(де M_S позначає повне насичення), яка притаманна феримагнітній фазі LM. Для J_2/J_1 приблизно від 0.974 до 2, основний стан у нульовому полі є сильно виродженою DT фазою, що характеризується щільним упакуванням синглет-тетрамерних станів $|t\rangle_d$, визначених рівнянням (7.40), тоді як решта димерів знаходяться в синглетному стані (7.33). У сильно фрустрованій області параметрів $J_2/J_1 > 2$ MD фаза (7.38) реалізується в основному стані, який був детально описаний вище.

Фазову діаграму основного стану, включаючи магнітне поле h , показано на рис. 7.11 у площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Як видно з рис. 7.11, фаза LM стійка до $h/J_1 \approx 4$ і поширюється до більших значень J_2/J_1 зі збільшенням магнітного поля. Навпаки, фаза MD (7.38) поширюється в бік менших $J_2/J_1 < 2$ у скінченних магнітних

полях порівняно з режимом параметрів, який доступний для варіаційного підходу. Ми також знаходимо, що для $J_2/J_1 \geq 4$ фаза MD є стабільною аж до поля насичення $h_{\text{sat}} = J_1 + J_2$, за межами якого виникає фаза повністю поляризованого, насиченого парамагнетика (PM). З іншого боку, фаза DT швидко звужується для скінченних магнітних полів і повністю зникає при $h/J_1 \approx 0.5$.

Окрім вже згаданих фаз LM, DT, MD і PM на фазовій діаграмі (рис. 7.11) ідентифікуємо також фазу скошених спінів (SC), де намагніченість неперервно зростає при збільшенні магнітного поля. Як показано на рис. 7.12, усередині фази SC локальні спіни мономеру неперервно вилаштовуються у напрямку магнітного поля з його збільшенням. Спочатку локальна намагніченість димера трохи зменшується, перш ніж зрештою прямує до повної поляризації. Якісно ця поведінка добре відображена класичною моделлю Гайзенберга зі змішаним спіном-(1/2,1), як це показано в додатку статті [37]. Крім того, на рис. 7.11 показано, що фаза SC відокремлена від фази PM і LM квантовими фазовими переходами другого роду, керованими полем. На противагу цьому, усі інші фазові переходи між різними фазами основного стану, індуковані полем, є першого роду.

Фазову діаграму та характер переходів на рис. 7.11 можна безпосередньо ідентифікувати з кривих намагніченості при нульовій температурі, наведених на рис. 7.13. Представлені криві намагніченості отримано двома різними числовими методами: точною діагоналізацією для $N_s = 20, 30$ і методом DMRG, доповненим точними аналітичними результатами для $N_s = 180$, відповідно. Загалом результати, отримані за допомогою обох методів, чудово узгоджуються, беручи до уваги, що в межах фази SC менший розмір системи або з $N_s = 20$, або з $N_s = 30$ призводить до більш виражених сходинок у профілі намагніченості.

Точніше, для співвідношення взаємодій $J_2/J_1 = 0.5$ намагніченість демонструє розширене 3/5-плато при низьких полях, характерних для феримагнітної фази LM, з подальшим зростанням намагніченості, що закінчується в повністю насиченій фазі PM при магнітному полі $h/J_1 = 5$. Стрибок M при наближенні до межі нульового поля не є числовим артефактом, а відображає феримагнітну природу фази LM, тобто негайну реакцію на нескінченно мале поле.

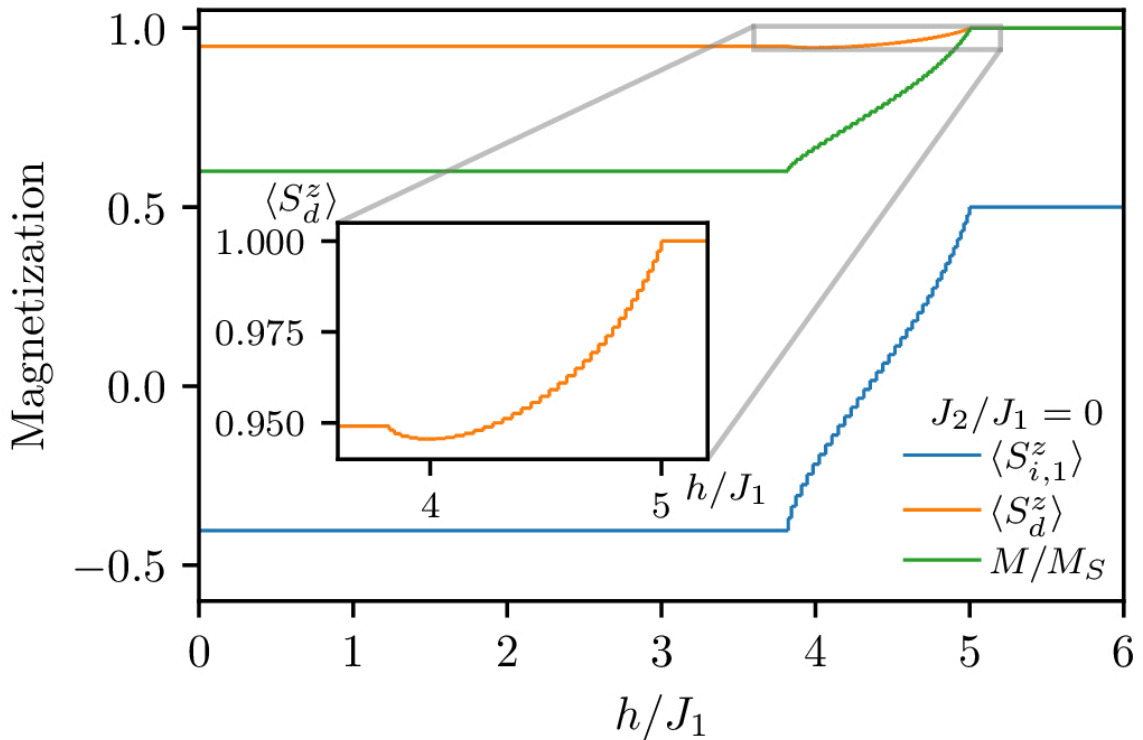


Рис. 7.12. Локальна намагніченість димера $\langle S_d^z \rangle$, локальна намагніченість мономера $\langle S_{i,1}^z \rangle$ і загальна намагніченість M (поділена на намагніченість насичення M_S) при нульовій температурі, як функції магнітного поля h/J_1 для $J_2 = 0$, як отримано з DMRG для системи $L = 6$.

Подібним чином, виявляється плато нульової намагніченості для $J_2/J_1 = 1.3$ і $J_2/J_1 = 1.7$ на рис. 7.13(b) і 7.13(c) притаманне щільному стану ДТ. Для більших значень $J_2/J_1 > 2$, показаних на рис. 7.13(d), 7.13(e) і 7.13(f), плато нульової намагніченості зникає. Натомість тут спіни мономерів стають повністю поляризованими в межах фази МД вже при як-завгодно слабкому магнітному полі. У той час як для нижчого значення $J_2/J_1 = 2.5$ можна спостерігати 3/5-плато LM-фази та подальше постійне зростання намагніченості в SC-фазі, крива намагніченості для вищого значення $J_2/J_1 = 3.3$ демонструє фазовий перехід другого роду, керований полем, від фази МД (1/5-плато) до фази SC. Нарешті, крива намагніченості для досить високих значень $J_2/J_1 \geq 4$ показує прямий стрибок намагніченості від 1/5-плато фази МД до повністю насиченого режиму РМ.

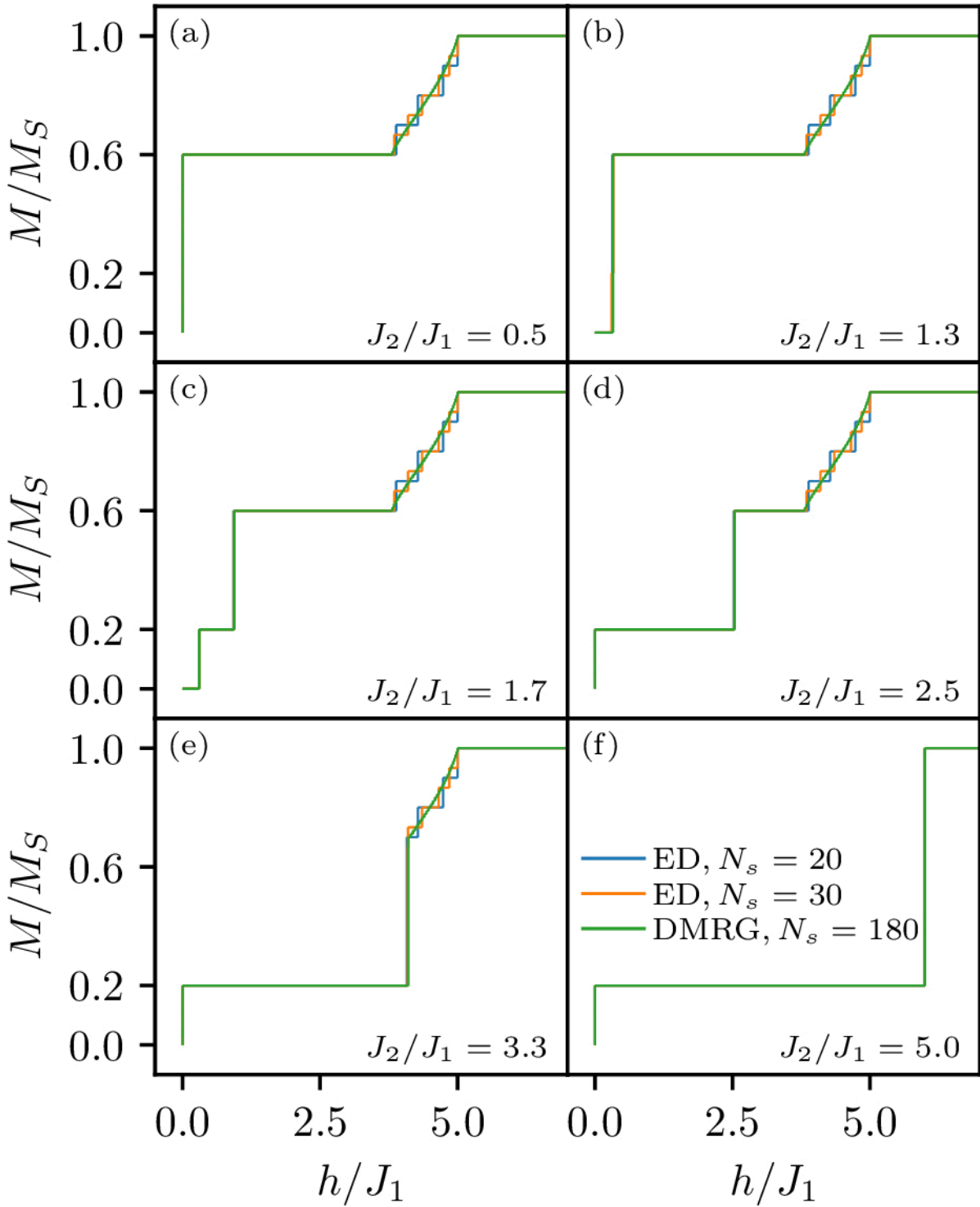


Рис. 7.13. Криві намагнічення при нульовій температурі антиферромагнетика Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованої ромбами, отримані з повної точної діагоналізації та методу DMRG для розмірів системи $N_s = 20$, $N_s = 30$ і $N_s = 180$, відповідно, для кількох значень співвідношення взаємодії J_2/J_1 .

7.2.2. Температурні фазові переходи

Фрустрація у квантовій моделі Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованій ромбами проявляється також у термодинамічних властивостях моделі. Тут зупинимось на температурних фазових переходах близько до межі між LM і MD фазами. Як висвітлено вище, у присутності скінченного магнітного поля $h \gtrsim 0.5J_1$ стани LM і MD при $T = 0$ розділені прямою лінією квантових фазових переходів першого роду. Через цю лінію, стани димерів змінюються з триплетів у фазі LM на синглетні стани у фазі MD.

Нещодавно такі квантові фазові переходи у зв'язаних спін-димерних і спін-тримерних системах досліджувалися для інших моделей [146, 147, 257], і було показано, що температурні фазові переходи першого роду виникають із ліній квантових фазових переходів першого роду, що закінчуються лінією температурних критичних точок. Крім того, ці критичні точки належать до двовимірного класу універсальності Ізинґа, відповідно до бінарної змінної, пов'язаної з наявністю/відсутністю синглетного стану на спінових димерах, таких як змінна n_d ($n_d = 1$ ($n_d = 0$) відповідає синглетному (триплетному) стану нв димері d). Тут лінія переходу LM-MD пропонує іншу реалізацію такого сценарію. Тому розглянемо його детальніше. Як приклад, рис. 7.14 демонструє середнє заповнення димерів синглетами

$$n_s = \left\langle \frac{1}{2N} \sum_{d=1}^{2N} n_d \right\rangle \quad (7.42)$$

як функцію від J_2 вздовж постійного відношення $h/J_1 = 2.5$ через область LM-MD переходу. При низьких температурах ця величина демонструє стрибок від значення 0 до значення 1 при збільшенні J_2/J_1 через квантовий фазовий перехід поблизу $J_2/J_1 \approx 2.5$. Для температур понад $0.3J_1$ натомість спостерігається плавна зміна n_s зі збільшенням J_2 . Це вже вказує на існування лінії низькотемпературних фазових переходів першого роду і їх закінчення в критичній точці. Хоча точне положення критичної точки потрібно визначити з моделювання QMC (як детально описано нижче), лінію переходу першого роду при скінченній тем-

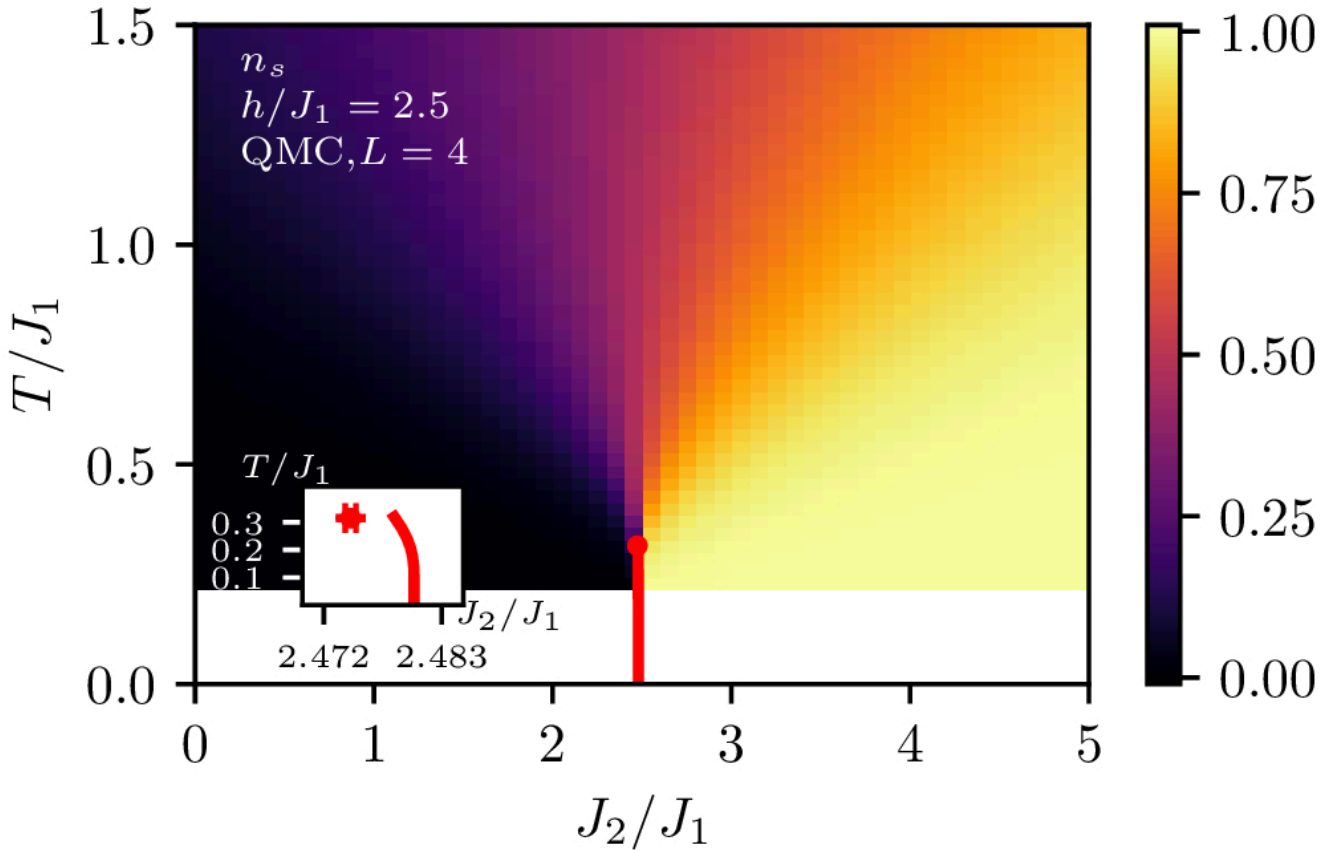


Рис. 7.14. Середня заповнення синглетами поблизу переходу LM-MD для $h/J_1 = 2.5$, отримана квантовим методом Монте-Карло для розміру системи $L = 4$. Червона лінія показує лінію переходу першого порядку, отриману в результаті порівняння вільних енергій обох фаз, розширену до розташування критичної точки (символу), отриману з скінченнорозмірного аналізу даних QMC. У низькотемпературній області (біла) дані QMC демонструють великі статистичні флуктуації та були обрізані.

пературі можна оцінити шляхом простого порівняння вільних енергій обох фаз, дотримуючись підходу, використаного в роботах [147, 257].

Обидві фази LM і MD мають скінченну щілину у спектрі збуджень відносно основних станів. Тут, ми використовуємо загальну оцінку вільної енергії щілинних систем при низьких температурах, які у відповідному режимі параметрів задаються таким чином

$$\frac{F}{N} = -\frac{1}{N} T \ln Z \approx \frac{E_0}{N} - 2T \ln(1 + e^{-\Delta/T}), \quad (7.43)$$

де E_0 — енергія основного стану, а Δ — щілина у спектрі збуджень. Множник перед логарифмом у рівнянні (7.43) враховує два димери в елементарній комір-

ці. Зауважимо, що у фазі MD та для $h > J_1 + J_2$, рівняння (7.43) відповідає низькотемпературному наближенню точного виразу для моделі ефективного ґраткового газу локалізованих магнонів [37]. При фіксованому магнітному полі лінія переходу отримується з точок $J_2^c(T_c)$, для яких виконується умова співіснування $F_{\text{LM}}(J_2^c, T^c) = F_{\text{MD}}(J_2^c, T^c)$. Базуючись на рівнянні (7.43), очікується, що лінія першого порядку не буде вертикальною, а загинається до фази з більшою щільною у спектрі збуджень.

Для кількісної оцінки лінії переходу потрібні значення E_0 і Δ в обох фазах при наближенні до точки переходу. Ми використали точну діагоналізацію для системи з $N_s = 30$ вузлів, щоб отримати оцінку щільності у спектрі збуджень. Δ як функція співвідношення взаємодії J_2/J_1 для різних магнітних полів h показано на рис. 7.15. Ми виявили, що при переході від магнітного поля $h/J_1 = 2$ до $h/J_1 = 2.5$ щільність збуджень у фазі LM стає більшою, ніж у фазі MD. Таким чином, очікується, що вигин лінії першого порядку зміниться зі збільшенням магнітного поля. Зокрема, для випадку $h/J_1 = 2,5$, розглянутого вже на рис. 7.14, лінія трохи згинається вліво. Однак це майже не видно в масштабі головної панелі рис. 7.14. Вигин краще видно на вставці, який також показує розташування критичної точки, отримане з подальшого моделювання QMC (як детально описано нижче). На основі аргументу про вільну енергію ми не можемо визначити розташування критичної точки, але зі вставки рис. 7.14 ми знаходимо, що її розташування приблизно збігається з передбачуваною лінією переходу першого порядку. Відхилення, яке видно на вставці, можна аргументувати таким чином: форма рівняння (7.43) відповідає точному виразу у фазі MD, тоді як у фазі LM знехтувано дисперсійним характером збуджень над щільною Δ . Отже, середня енергія збудження в фазі LM буде фактично більшою за Δ , так що лінія переходу справді має нахилитися далі до меншого J_2 .

Основна панель рис. 7.16 показує питому теплоємність C у перехідному режимі. Тут ми спостерігаємо дві чітко виражені лінії максимумів, які розширюються від розташування критичної точки, що дуже схоже на поведінку, яка спостерігалася раніше у подібних системах [146, 147, 257].

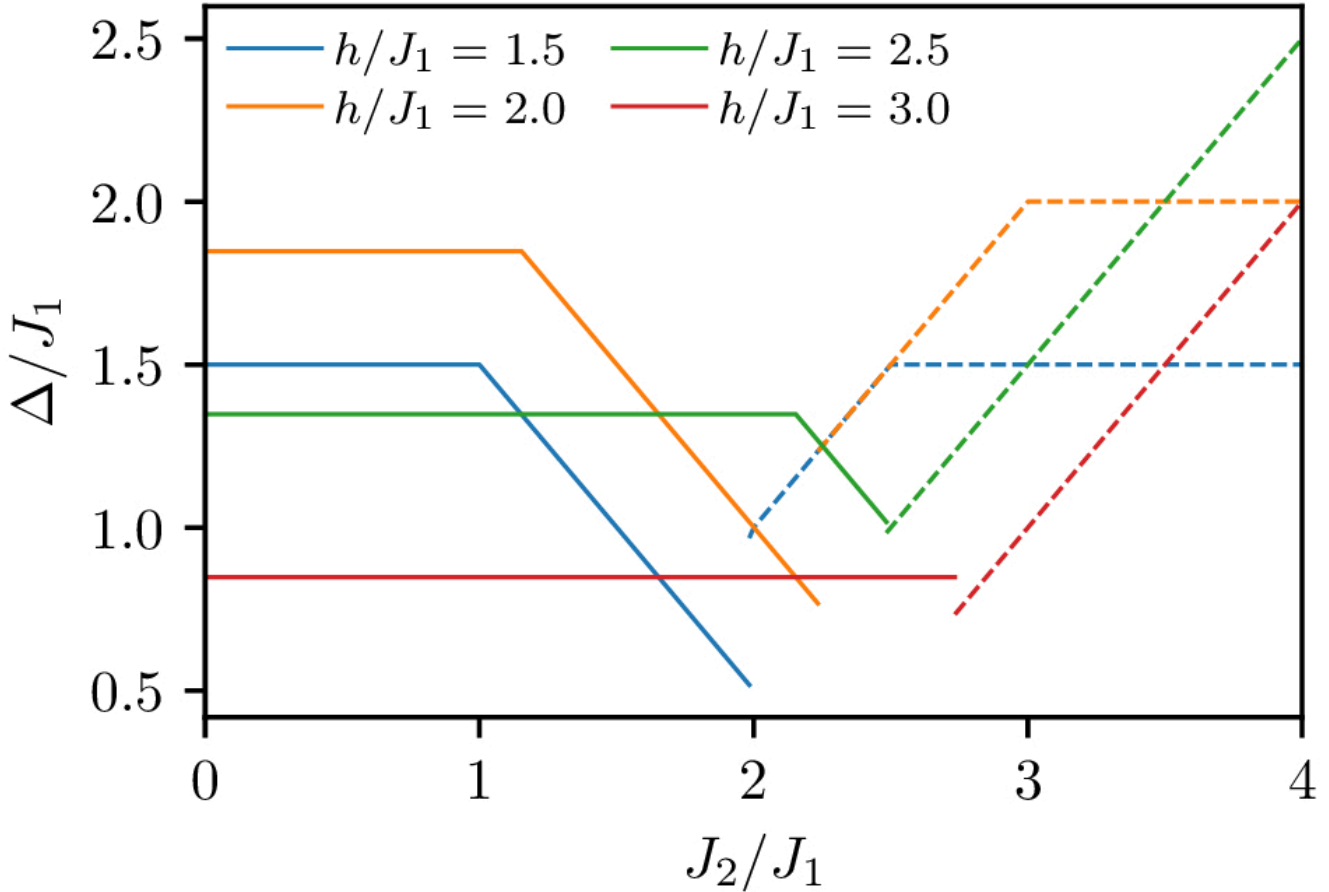


Рис. 7.15. Щілина збуджень Δ/J_1 як функція відношення взаємодій J_2/J_1 для різних магнітних полів h/J_1 , отримана з точної діагоналізації для системи $N_s = 30$. Суцільні (штриховані) лінії позначають щілину збуджень в режимі LM (MD).

Щоб коректно визначити критичну точку, проаналізовано скінченнорозмірний скейлінг для флуктуацій середнього заповнення синглетами, а саме, відповідну синглетну сприйнятливість [147],

$$\chi_s = \frac{\beta}{4N} \left(\left\langle \left(\sum_{d=1}^{2N} n_d \right)^2 \right\rangle - \left\langle \sum_{d=1}^{2N} n_d \right\rangle^2 \right). \quad (7.44)$$

На лівій панелі рис. 7.17 показано цю величину для різних розмірів системи при фіксованій температурі $T/J_1 = 0.32$ в перехідній області, де дані демонструють яскраво виражені максимуми. У рамках класу універсальності двовимірної моделі Ізинґа, максимальне значення масштабується як $\chi_s^{\max} \propto L^{7/4}$ [147]. Цю властивість можна використати для отримання значення T_c із скінченнорозмірного аналізу для положення піку, як показано на верхній правій панелі рис. 7.17,

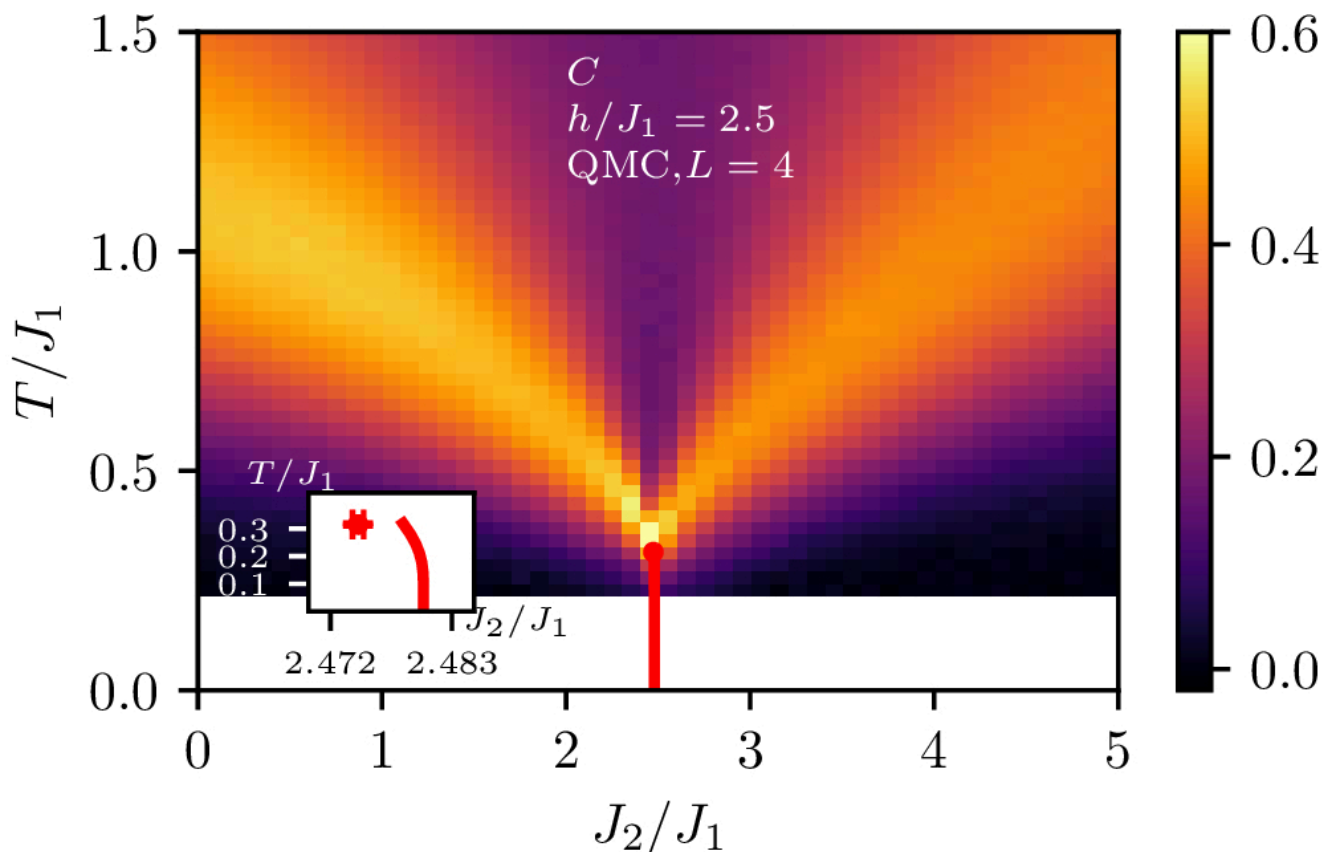


Рис. 7.16. Питома теплоємність поблизу LM-MD переходу для $h/J_1 = 2.5$, отримана QMC для розміру системи $L = 4$. Червона лінія показує лінію переходу першого порядку, отриману в результаті порівняння вільних енергій обох фаз, розширену до розташування критичної точки (символу), отриману скінченнорозмірного аналізу даних QMC. У низькотемпературній області (біла) дані QMC демонструють великі статистичні флуктуації та були обрізані.

що дає $T_c/J_1 = 0.315(5)$. Аналізуючи відповідні значення J_2/J_1 положення піку, див. нижню праву панель рис. 7.17, також отримуємо критичний коефіцієнт $(J_2/J_1)_c = 2.4745(5)$. Разом вони дають приблизне розташування критичної точки, яка вже показана на рис. 7.14 і 7.16.

Також проведено відповідний аналіз при $h/J_1 = 2$. Тут, відповідно до щільності у спектрі збуджень, показаних на рис. 7.15, очікуємо, що лінія першого порядку буде згинатися вправо. Це дійсно підтверджується нашим аналізом згідно відповідних даних для питомої теплоємності, показаних на рис. 7.18. Невеликі відхилення, які можна побачити на вставці рис. 7.18 можна пояснити тим самим

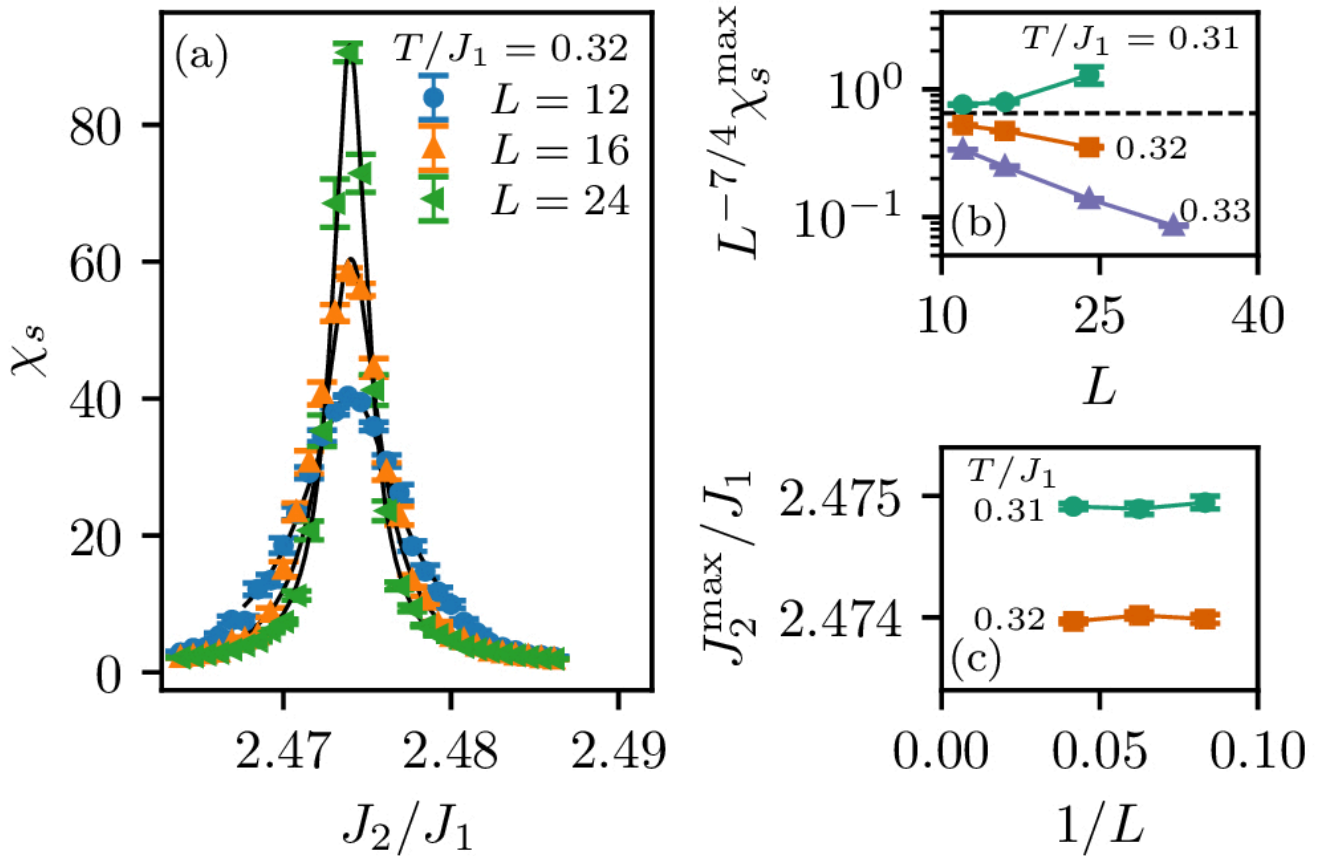


Рис. 7.17. Ліва панель: синглетна сприйнятливість χ_s для фіксованої температури $T/J_1 = 0.32$ поблизу точки переходу для $h/J_1 = 2.5$ і різних розмірів системи, як отримано з моделювання QMC. Права панель: скінченнорозмірний скейлінг пікового значення та його положення для визначення розташування критичної точки на $h/J_1 = 2.5$.

аргументом, що й у випадку $h/J_1 = 2.5$, тобто нехтуванням дисперсійним характером збуджень у LM фазі.

7.2.3. Точні результати для гібридної моделі Ізинґа-Гайзенберґа

Модель Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами, розглянута вище, допускає точні результати лише в основному стані для певного набору параметрів. Тут ми запроваджує простіший варіант моделі Ізинґа-Гайзенберґа, яка дозволить нам проаналізувати температурні фазові переходи в межах строгого підходу. Спін-1/2 модель Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій

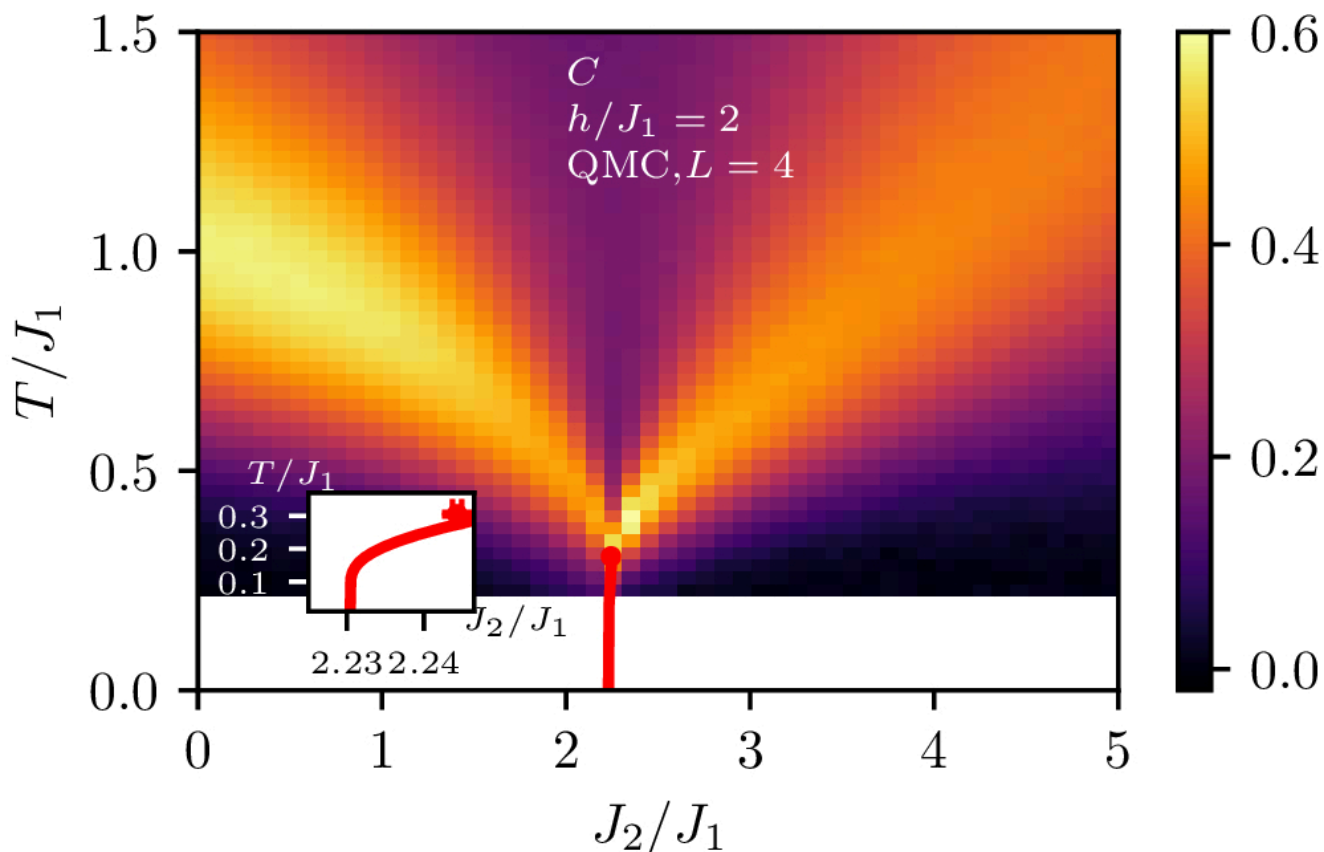


Рис. 7.18. Питома теплоємність поблизу переходу LM-MD для $h/J_1 = 2$, отримана QMC методом для розміру системи $L = 4$. Червона лінія показує лінію переходу першого порядку, отриману в результаті порівняння вільних енергій обох фаз, розширену до розташування критичної точки (символу), отриману з скінченнорозмірного скейлінгу даних QMC. У низькотемпературній області (біла) дані QMC демонструють великі статистичні флуктуації та були обрізані.

ромбами описується таким гамільтоніаном

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & J_1 \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \left[\left(\hat{S}_{1,i,j}^z + \hat{S}_{1,i+1,j}^z \right) \left(\hat{S}_{2,i,j}^z + \hat{S}_{3,i,j}^z \right) + \left(\hat{S}_{1,i,j}^z + \hat{S}_{1,i,j+1}^z \right) \left(\hat{S}_{4,i,j}^z + \hat{S}_{5,i,j}^z \right) \right] \\
 & + J_2 \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \left(\hat{\mathbf{S}}_{2,i,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{3,i,j} + \hat{\mathbf{S}}_{4,i,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{5,i,j} \right) - h \sum_{k=1}^5 \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L \hat{S}_{k,i,j}^z. \quad (7.45)
 \end{aligned}$$

Тут спин-1/2 оператори $\hat{\mathbf{S}}_{k,i,j} \equiv (\hat{S}_{k,i,j}^x, \hat{S}_{k,i,j}^y, \hat{S}_{k,i,j}^z)$ приписуються кожному вузлу квадратної ґратки, декорованої ромбами, де перший індекс k визначає позицію вузла в елементарній комірці, а останні два індекси i та j визначають позицію (в термінах рядка та стовпця) самої елементарної комірочки. Константа J_1 враховує

обмінну взаємодію типу Ізинґа між найближчими спінами Ізинґа та Гайзенберґа, тоді як константа J_2 кількісно визначає ізотропну обмінну взаємодію між найближчими спінами Гайзенберґа. Останній член враховує Зеєманову енергію спінів Гайзенберґа та Ізинґа в зовнішньому магнітному полі h .

Для зручності повний гамільтоніан (7.45) нашої моделі можна переписати як суму кластерних гамільтоніанів:

$$\hat{H} = \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L (\hat{H}_{i,j}^h + \hat{H}_{i,j}^v), \quad (7.46)$$

де кожен кластерний гамільтоніан $\hat{H}_{i,j}^h$ ($\hat{H}_{i,j}^v$) включає всі взаємодіючі доданки ромбічного спінового кластера, який містить один горизонтальний (вертикальний) Гайзенберґовий димер

$$\begin{aligned} \hat{H}_{i,j}^h &= J_1(\hat{S}_{1,i,j}^z + \hat{S}_{1,i+1,j}^z)(\hat{S}_{2,i,j}^z + \hat{S}_{3,i,j}^z) + J_2\hat{\mathbf{S}}_{2,i,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{3,i,j} \\ &\quad - h(\hat{S}_{2,i,j}^z + \hat{S}_{3,i,j}^z) - \frac{h}{4}(\hat{S}_{1,i,j}^z + \hat{S}_{1,i+1,j}^z), \\ \hat{H}_{i,j}^v &= J_1(\hat{S}_{1,i,j}^z + \hat{S}_{1,i,j+1}^z)(\hat{S}_{4,i,j}^z + \hat{S}_{5,i,j}^z) + J_2\hat{\mathbf{S}}_{4,i,j} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{5,i,j} \\ &\quad - h(\hat{S}_{4,i,j}^z + \hat{S}_{5,i,j}^z) - \frac{h}{4}(\hat{S}_{1,i,j}^z + \hat{S}_{1,i,j+1}^z). \end{aligned} \quad (7.47)$$

Множник $1/4$ у доданку Зеємана Ізинґових спінів забезпечує правильний підрахунок його повного вкладу, який симетрично розбивається між чотирма кластерними гамільтоніанами, що включають один і той самий спін Ізинґа. Розклад повного гамільтоніана (7.45) на набір комутуючих кластерних гамільтоніанів (7.47) дозволяє частково розкласти загальну статистичну суму на добуток кластерних статистичних сум:

$$Z = \sum_{\{S_{1,i,j}^z\}} \prod_{i=1}^L \prod_{j=1}^L [\text{Tr}_{2,i,j} \text{Tr}_{3,i,j} \exp(-\beta \hat{H}_{i,j}^h)] [\text{Tr}_{4,i,j} \text{Tr}_{5,i,j} \exp(-\beta \hat{H}_{i,j}^v)]. \quad (7.48)$$

З формули (7.48) видно, що спінові ступені вільності різних димерів Гайзенберґа можна відсумувати незалежно. Пряма діагоналізація кластерних гамільтоніанів (7.47) у димерному базисі допомагає обчислити ефективні ваги Больцмана, які

можна замінити за допомогою узагальненого декораційно-ітераційного перетворення [288, 385, 386]. Явна форма перетворення для горизонтальних і вертикальних ромбічних спінових кластерів задається таким чином:

$$\text{Tr}_{2,i,j} \text{Tr}_{3,i,j} \exp(-\beta \hat{H}_{i,j}^h) = A \exp \left[\beta J_{\text{eff}} S_{1,i,j}^z S_{1,i+1,j}^z + \frac{\beta h_{\text{eff}}}{4} (S_{1,i,j}^z + S_{1,i+1,j}^z) \right], \quad (7.49)$$

$$\text{Tr}_{4,i,j} \text{Tr}_{5,i,j} \exp(-\beta \hat{H}_{i,j}^v) = A \exp \left[\beta J_{\text{eff}} S_{1,i,j}^z S_{1,i,j+1}^z + \frac{\beta h_{\text{eff}}}{4} (S_{1,i,j}^z + S_{1,i,j+1}^z) \right]. \quad (7.50)$$

Фізичний зміст декораційно-ітераційних перетворень (7.49) і (7.50) полягає в заміні ваг Больцмана, пов'язаних із кластером спінів ромба, еквівалентним виразом, який виключно залежить лише від двох Ізингових спінів. З рівнянь (7.49) та (7.50) прямо випливає, що спіновий димер Гайзенберга та пов'язані з ним умови взаємодії можна замінити ефективною взаємодією J_{eff} та ефективним полем h_{eff} , що приписується двом сусіднім Ізинговим спінам.

Лише три незалежні рівняння отримуються з декораційно-ітераційних перетворень (7.49) та (7.50), перебираючи всі чотири можливі комбінації двох спінів Ізинга, які однозначно визначають параметри перетворення як A , J_{eff} , h_{eff} :

$$A = e^{\frac{3}{4}\beta J_2} (V_1 V_2 V_3^2)^{\frac{1}{4}}, \quad (7.51)$$

$$\beta J_{\text{eff}} = \ln \left(\frac{V_1 V_2}{V_3^2} \right), \quad (7.52)$$

$$\beta h_{\text{eff}} = \beta h + 2 \ln \left(\frac{V_1}{V_2} \right), \quad (7.53)$$

де

$$\begin{aligned} V_1 &= 1 + e^{-\beta J_2} [1 + 2 \cosh(\beta J_1 - \beta h)], \\ V_2 &= 1 + e^{-\beta J_2} [1 + 2 \cosh(\beta J_1 + \beta h)], \\ V_3 &= 1 + e^{-\beta J_2} [1 + 2 \cosh(\beta h)]. \end{aligned} \quad (7.54)$$

Застосування формул (7.49) і (7.50) у факторизованій формі статистичної суми (7.48) встановлює точне відображення між статистичними сумами спін-1/2 моделі Ізинга-Гайзенберга на квадратній ґратці, декорованій ромбами і ефективною спін-1/2 моделі Ізинга на квадратній ґратці:

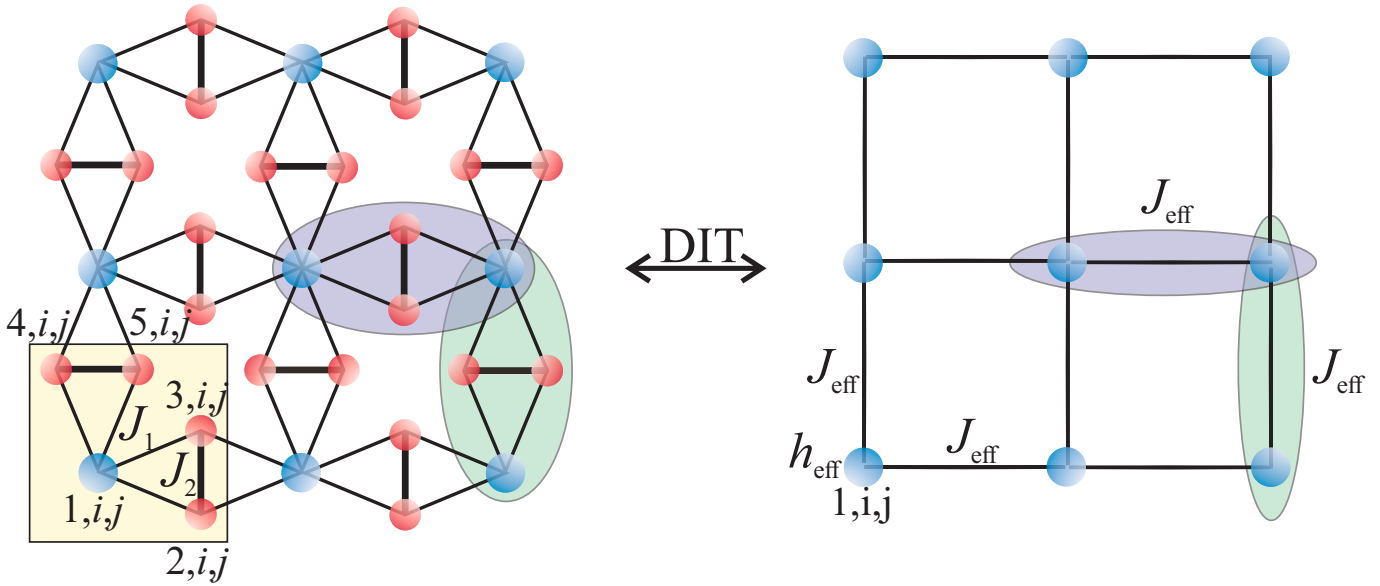


Рис. 7.19. Відображення між спін-1/2 моделлю Ізинґа-Ґайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами, і ефективною моделлю Ізинґа на квадратній ґратці, отримане шляхом декораційно-ітераційного перетворення (7.49) та (7.50) до всіх горизонтальних і вертикальних ромбових спінових кластерів.

$$Z(\beta, J_1, J_2, h) = A^{2N} Z_{\text{eff}}(\beta, J_{\text{eff}}, h_{\text{eff}}), \quad (7.55)$$

яке визначається за допомогою ефективного гамільтоніана, що включає залежну від температури взаємодію найближчих сусідів J_{eff} і магнітне поле h_{eff} (див. рис. 7.19 для ілюстрації встановленого відображення):

$$H_{\text{eff}} = - J_{\text{eff}} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L (S_{1,i,j}^z S_{1,i+1,j}^z + S_{1,i,j}^z S_{1,i,j+1}^z) - h_{\text{eff}} \sum_{i=1}^L \sum_{j=1}^L S_{1,i,j}^z. \quad (7.56)$$

Оскільки коефіцієнт A у рівнянні (7.55) є регулярною функцією (див. рівняння (7.51)), Z успадковує сингулярну структуру від Z_{eff} так, що будь-який неперервний температурний фазовий перехід, що виникає, буде в класі універсальності двовимірної моделі Ізинґа.

Локальні спостережувані величини можна обчислити на основі відповідності між оригінальною і ефективною моделями. Зокрема, локальна намагніченість початкових спінів Ізинґа та кореляційна функція між найближчими Ізинґовими

спінами впливають зі статей [387, 388]:

$$\begin{aligned} m_{\text{I}} &\equiv \langle \hat{S}_{1,i,j}^z \rangle = \langle S_{1,i,j}^z \rangle_{\text{eff}} \equiv m_{\text{eff}} \\ \varepsilon_{\text{I}} &\equiv \langle \hat{S}_{1,i,j}^z \hat{S}_{1,i+1,j}^z \rangle = \langle S_{1,i,j}^z S_{1,i+1,j}^z \rangle_{\text{eff}} \equiv \varepsilon_{\text{eff}}, \end{aligned} \quad (7.57)$$

де $\langle \dots \rangle$ і $\langle \dots \rangle_{\text{eff}}$ позначають стандартне канонічне середнє по ансамблю вихідної моделі (7.45) та ефективного гамільтоніану моделі Ізинґа (7.56), відповідно. Отже, локальна намагніченість m_{I} і кореляційна функція найближчих сусідів ε_{I} прямо дорівнюють величинам m_{eff} і ε_{eff} ефективної моделі Ізинґа з ефективною взаємодією J_{eff} та ефективним полем h_{eff} . Крім того, відображення (7.55) між статистичними сумами, у свою чергу, забезпечує явну формулу для вільної енергії оригінальної моделі (7.45) $F = -k_{\text{B}}T \ln Z$, з якої відповідно можна розрахувати повну намагніченість

$$M_{\text{T}} = -\frac{\partial F}{\partial h} = 2N \frac{\partial \ln A}{\partial(\beta h)} + \frac{\partial \ln Z_{\text{eff}}}{\partial(\beta h)}. \quad (7.58)$$

Повернемося до моделі Ізинґа у нульовому полі на квадратній ґратці, яку можна точно розв'язати за допомогою розв'язку Онзагера [389]. Завдяки точному відношенню відображення (7.55) між обома статистичними сумами, модель Ізинґа-Гайзенберґа у магнітному полі (7.45) також стає точно розв'язною в окремому підпросторі параметрів, де ефективне поле рівне нулю, $h_{\text{eff}} = 0$. З рівняння (7.53) випливає:

$$\exp\left(\frac{\beta h}{2}\right) = \frac{1 + e^{-\beta J_2} [1 + 2 \cosh(\beta J_1 + \beta h)]}{1 + e^{-\beta J_2} [1 + 2 \cosh(\beta J_1 - \beta h)]}. \quad (7.59)$$

Виявляється, що трансцендентне рівняння (7.59), яке забезпечує нульове ефективне поле $h_{\text{eff}} = 0$, також має нетривіальний розв'язок для скінченних магнітних полів $h \neq 0$ і даної температури, окрім тривіального розв'язку $h = 0$, який є дійсним для будь-якої температури. Одним із важливих наслідків точного розв'язку Онзагера [389] є те, що спін-1/2 модель Ізинґа на квадратній ґратці в нульовому (ефективному) полі демонструє неперервний фазовий перехід при критичній температурі $\beta_c J_{\text{eff}} = J_{\text{eff}}/(k_{\text{B}}T_c) = 2 \ln(1 + \sqrt{2})$, що в свою чергу передбачає існування

аналогічних неперервних фазових переходів класу універсальності двовимірної моделі Ізинга для вихідної моделі Ізинга-Гайзенберга щоразу, коли виконується така критична умова:

$$\exp\left(\frac{\beta_c h}{4}\right)(1+\sqrt{2}) = \frac{1 + e^{-\beta_c J_2} [1 + 2 \cosh(\beta_c (J_1 + h))]}{1 + e^{-\beta_c J_2} [1 + 2 \cosh(\beta_c h)]}. \quad (7.60)$$

Спін-1/2 модель Ізинга на квадратній ґратці в ненульовому (ефективному) магнітному полі не є точно розв'язною, тому в загальному випадку потрібно вдаватися до числових методів. Для дослідження моделі у різних магнітних полях ми виконали класичне моделювання методом Монте-Карло ефективної спін-1/2 моделі Ізинга на квадратній ґратці, використовуючи стандартний алгоритм Метрополіса реалізованому в пакеті ALPS [384] для ґраток скінченного розміру з лінійними розмірами до $L = 120$ і загальною кількістю до 8×10^5 кроків Монте-Карло.

Обговорення результатів почнемо з представлення фазової діаграми основного стану, показаної на рис. 7.20 у площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Усі основні стани можуть бути отримані з власних станів з найнижчою енергією ромбічних спінових кластерів, заданих комутуючими локальними гамільтоніанами (7.47). Використовуючи цю процедуру, ми отримуємо три різні фази основного стану: насичену парамагнітну (PM) фазу, класичну феримагнітну (FRI) фазу та квантову мономер-димерну (MD) фазу (див. детальні визначення нижче). Порівнюючи відповідні енергії основного стану, можна отримати точні формули для меж фаз першого порядку:

$$h_{\text{MD-FRI}} = 2(J_2 - J_1), \quad (7.61)$$

$$h_{\text{MD-PM}} = J_2 + J_1, \quad (7.62)$$

$$h_{\text{FRI-PM}} = 4J_1. \quad (7.63)$$

Всі три лінії фазових переходів зустрічаються в потрійній точці $J_2/J_1 = 3$, $h/J_1 = 4$. При достатньо великих магнітних полях $h > h_{\text{FRI-PM}}$ для $J_2 < 3J_1$ і $h > h_{\text{MD-PM}}$ для $J_2 > 3J_1$ система в основному стані перебуває в PM фазі з усіма спінами,

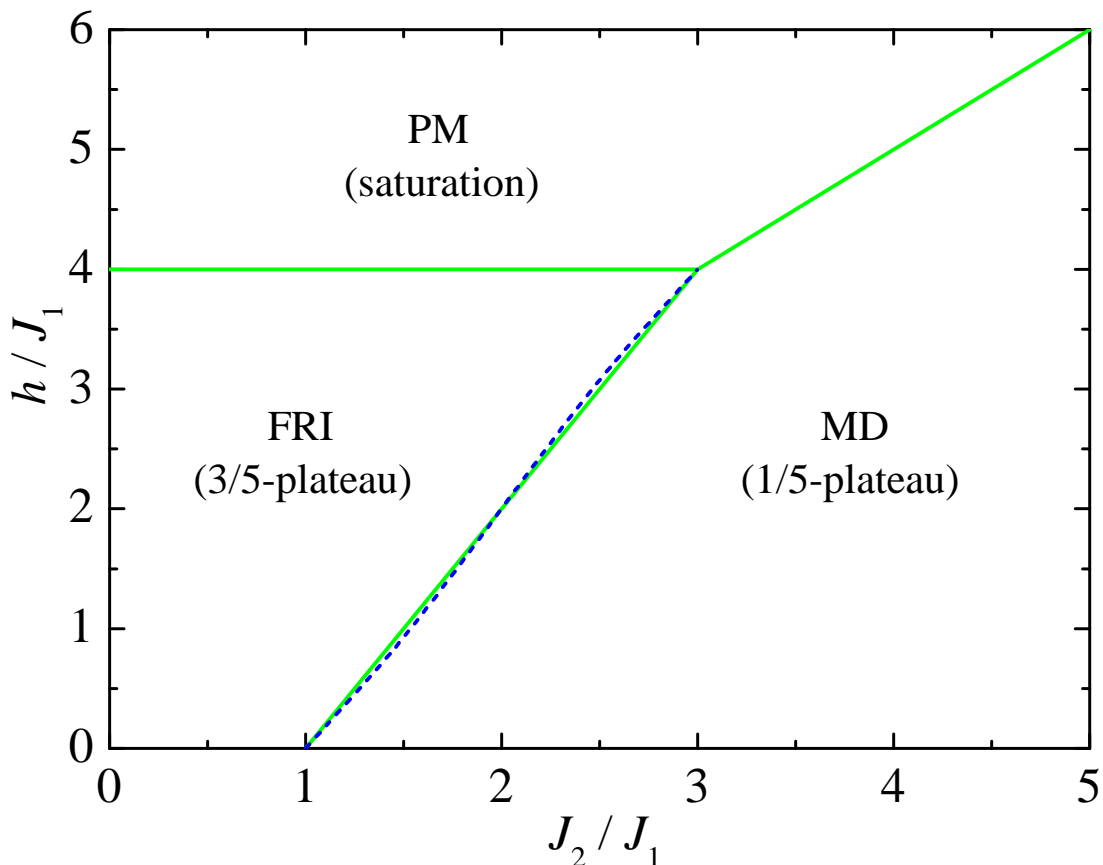


Рис. 7.20. Фазова діаграма основного стану моделі Ізинґа-Гайзенберґа (7.45) у площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Позначення для різних основних станів такі: FRI — класична феримагнітна фаза, MD — квантова мономер-димерна фаза та PM — насичена парамагнітна фаза. Пунктирна синя лінія показує проєкцію критичного стану (7.60) на площину $J_2/J_1 - h/J_1$.

поляризованими вздовж напрямку магнітного поля:

$$|\text{PM}\rangle = \prod_{i,j=1}^L |\uparrow_{1,i,j}\rangle \otimes |\uparrow_{2,i,j}\uparrow_{3,i,j}\rangle \otimes |\uparrow_{4,i,j}\uparrow_{5,i,j}\rangle. \quad (7.64)$$

Крім цієї досить тривіальної фази, два додаткові основні стани, схематично зображені на рис. 7.21, виникають при достатньо низьких магнітних полях. Перший основний стан можна ідентифікувати як фазу FRI з усіма спінами Гайзенберґа повністю поляризованими та всіма спінами Ізинґа, спрямованими протилежно магнітному полю:

$$|\text{FRI}\rangle = \prod_{i,j=1}^L |\downarrow_{1,i,j}\rangle \otimes |\uparrow_{2,i,j}\uparrow_{3,i,j}\rangle \otimes |\uparrow_{4,i,j}\uparrow_{5,i,j}\rangle. \quad (7.65)$$

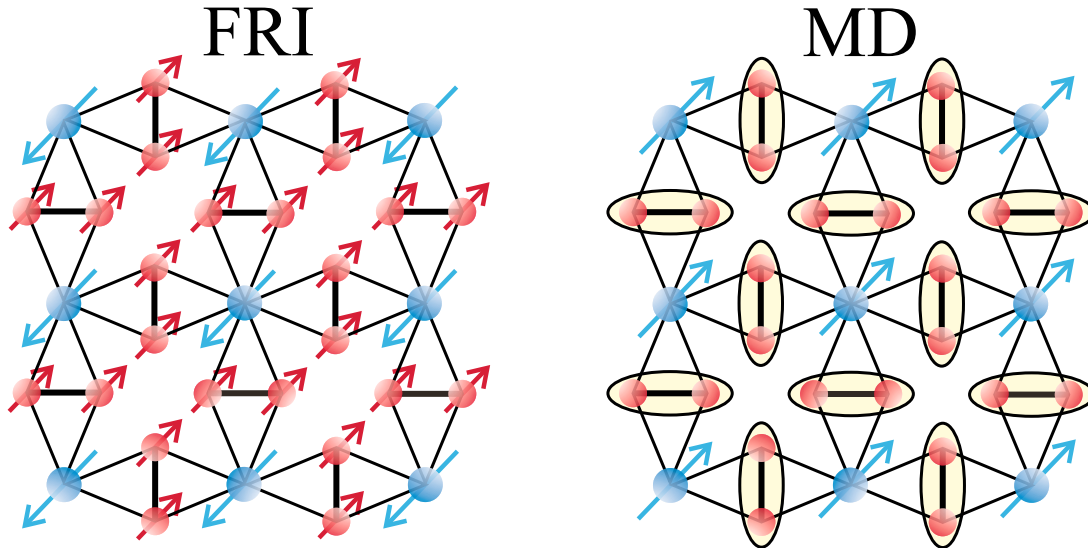


Рис. 7.21. Схематичне зображення класичної феримагнітної (FRI) фази та квантової мономер-димерної (MD) фази. Овал представляє стан синглетного димера.

Цей основний стан суто класичної природи виникає в проміжному діапазоні магнітного поля, що розмежований двома умовами $h < h_{\text{FRI-PM}}$ і $h > h_{\text{MD-FRI}}$. Фаза FRI (7.65) породжує 3/5-плато на кривій намагніченості при нульовій температурі відповідно до теореми Ліба-Матіса [109].

У діапазоні магнітного поля, обмеженому умовами $h < h_{\text{MD-FRI}}$ і $h < h_{\text{MD-PM}}$, натомість зустрічається основний стан MD з повністю поляризованими Ізинґовими спінами, а спіни Гайзенберґа утворюють димерні синглети,

$$\begin{aligned}
 |\text{MD}\rangle = \prod_{i,j=1}^L |\uparrow_{1,i,j}\rangle \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{2,i,j}\downarrow_{3,i,j}\rangle - |\downarrow_{2,i,j}\uparrow_{3,i,j}\rangle) \\
 \otimes \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow_{4,i,j}\downarrow_{5,i,j}\rangle - |\downarrow_{4,i,j}\uparrow_{5,i,j}\rangle),
 \end{aligned}
 \tag{7.66}$$

що призводить до 1/5-плато на кривій намагніченості при нульовій температурі. Проекція нульового ефективного поля (7.59) на площину $J_2/J_1 - h/J_1$, позначена синьою пунктирною лінією на рис. 7.20, точно слідує за межею фази з нульовою температурою між режимами основного стану FRI та MD.

Зазначимо, що фазові діаграми основного стану моделі Ізинґа-Гайзенберґа, показана на рис. 7.20 і відповідної моделі Гайзенберґа (7.31) (див. рис. 7.11) ви-

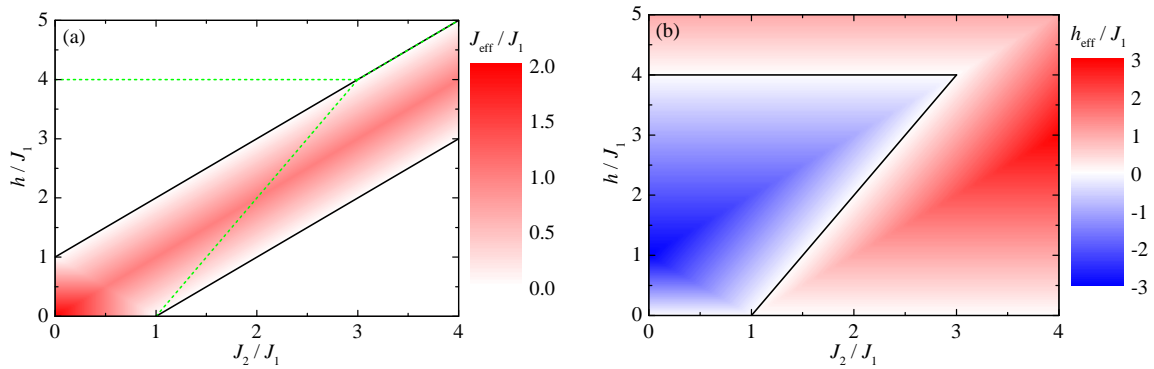


Рис. 7.22. Асимптотичні значення нульової температури ефективної взаємодії J_{eff} (а) та ефективного магнітного поля h_{eff} (б) у площині $J_2/J_1 - h/J_1$. Чорні суцільні лінії визначають нульові горизонталі для ефективної взаємодії $J_{\text{eff}} = 0$ та ефективного поля $h_{\text{eff}} = 0$. Зелені пунктирні лінії в (а) позначають межі фаз основного стану.

являють принципову схожість. Зокрема, обидві моделі мають розширену лінію квантового фазового переходу першого порядку, яка відділяє феримагнітний режим від режиму MD (у випадку Гайзенберга феримагнітна фаза все ще демонструє квантові флуктуації, на відміну від суто класичної природи основного стану FRI). Як буде показано далі, ми спостерігаємо таку ж цікаву термодинамічну поведінку на лінії фазових переходів другого роду, яку можна дослідити строго у випадку моделі Ізинга-Гайзенберга. Це додає цінне розуміння фізичного явища, що лежить в основі обох моделей. На завершення порівняння двох моделей зазначимо, що обидві моделі також демонструють високопольову фазу РМ, тоді як вузькі додаткові фази димер-тетрамер і спин-скошені фази, які з'являються у випадку Гайзенберга, відсутні у випадку Ізинга-Гайзенберга через анізотропну взаємодію Ізингових спінів.

На рис. 7.22 показано асимптотичні значення ефективної взаємодії J_{eff} та ефективного поля h_{eff} при нульовій температурі відповідно до точного відображення (7.55) між оригінальною та ефективною моделями. Наявність спонтанного дальнього порядку ефективної моделі вимагає нульового ефективного поля $h_{\text{eff}} = 0$ у поєднанні з ненульовою ефективною взаємодією $J_{\text{eff}} \neq 0$ [389]. З рис. 7.22(а) стає зрозумілим, що режим ненульової ефективної взаємодії $J_{\text{eff}} \neq 0$ обмежений досить вузькою смугою в області параметрів $h > J_2 - J_1$ і $h < J_1 + J_2$.

Таким чином, межа основного стану між фазами FRI та MD є єдиною, уздовж якої виконується вимога ненульової ефективної взаємодії $J_{\text{eff}} \neq 0$.

Рисунок 7.22(b) демонструє, що ефективне поле h_{eff} змінює знак на двох межах фази FRI. Насправді виявляється, що ефективне поле від'ємне ($h_{\text{eff}} < 0$) у фазі FRI, тоді як воно стає додатнім ($h_{\text{eff}} > 0$) у фазах MD та PM. Звідси випливає, що дві лінії нульового контуру ефективного поля $h_{\text{eff}} = 0$ збігаються з межами фаз основного стану для переходів FRI-PM і FRI-MD. Нагадаємо, що ефективна взаємодія зникає, $J_{\text{eff}} = 0$, вздовж межі основного стану між фазами FRI та PM, і, отже, цей фазовий перехід з нульовою температурою не може з'явитися при будь-якій скінченній температурі. На відміну від цього, інша нульова контурна лінія ефективного поля $h_{\text{eff}} = 0$, що стосується межі основного стану між фазами FRI та MD, супроводжується ненульовою ефективною взаємодією $J_{\text{eff}} \neq 0$. Отже, можливе розширення цього фазового переходу з нульовою температурою до скінченних температур стає можливим.

Далі детально розглядається температурна фазова діаграма моделі (7.45), яка зображена на рис. 7.23(a) у тривимірному просторі параметрів $h/J_1 - J_2/J_1 - k_B T/J_1$. Відповідно до фазової діаграми основного стану, показаної на рис. 7.20, зелена суцільна лінія, яка лежить на площині $h/J_1 - J_2/J_1$ рис. 7.23(a) відповідає нульовій температурі квантових фазових переходів першого роду між фазами FRI та MD. Однак слід зазначити, що співіснування фаз FRI та MD не обмежується нульовою температурою, оскільки нетривіальний розв'язок нульової умова поля (7.59) також поширюється на скінченні температури. Фактично виходить, що ефективне поле обертається в нуль $h_{\text{eff}} = 0$ уздовж розширеної поверхні, тобто стінки розривів. Ця стіна розповсюджується на червоні суцільні криві, які вибірково показано на рис. 7.23(a), кожна з яких представляє лінію теплових фазових переходів першого роду між фазами FRI та MD для вибраного значення співвідношення взаємодії J_2/J_1 . Ці лінії температурних фазових переходів першого роду закінчуються лінією критичних точок Ізинґа, однозначно визначених критичною умовою (7.60), утворюючи лінію фазових переходів другого роду, відображену на рис. 7.23(a) як синя пунктирна лінія.

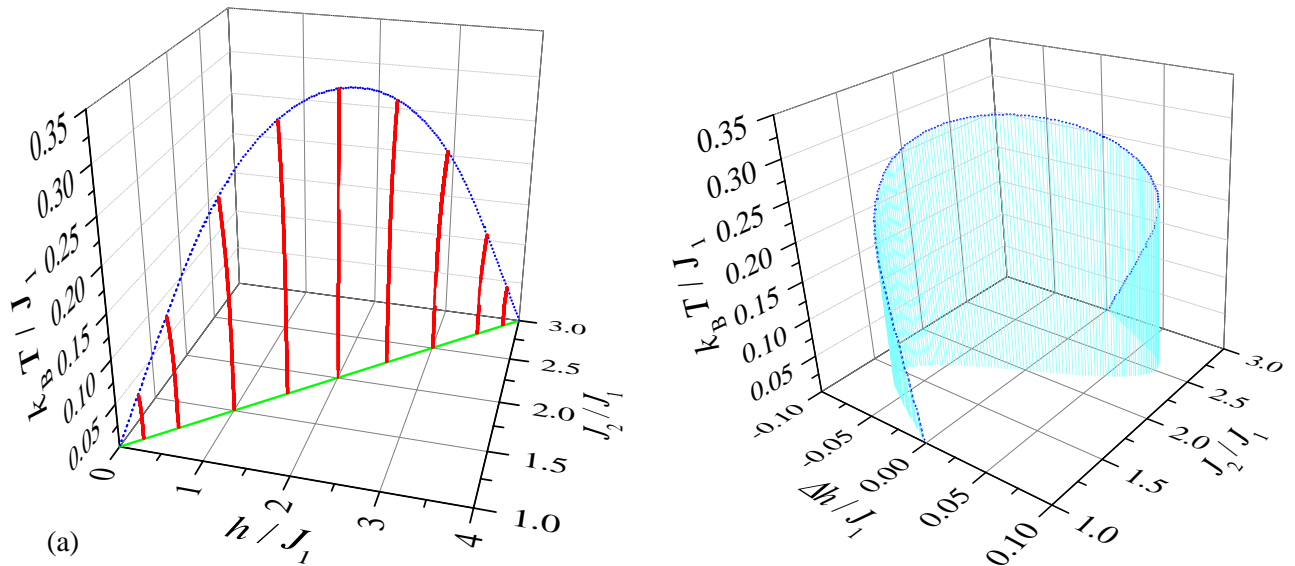


Рис. 7.23. (а) Повна фазова діаграма спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами, у просторі параметрів $h/J_1 - J_2/J_1 - k_B T/J_1$. Синя пунктирна крива позначає лінію критичних точок Ізинґа, на яких закінчуються лінії переходів першого роду (червоні суцільні лінії) між фазами FRI та MD. Зелена суцільна лінія в площині $h/J_1 - J_2/J_1$ визначає межу основного стану FRI/MD. (б) Синя пунктирна крива показує лінію критичних точок Ізинґа як функція зміни магнітного поля $\Delta h/J_1$ і співвідношення взаємодії J_2/J_1 , при цьому вертикальні лінії є відповідними проєкціями на $\Delta h/J_1 - J_2/J_1$ літак. Зміна магнітного поля $\Delta h/J_1$ визначається різницею координати магнітного поля критичної точки Ізинґа та відповідної межі фаз основного стану FRI-MD.

Лінії фазових переходів першого роду (тобто суцільні червоні криві) не є ідеально вертикальними, що означає, що магнітне поле, яке приписується співіснуванню фаз FRI та MD, злегка вигинається при підвищенні температури, тоді як співвідношення взаємодії J_2/J_1 зберігається постійним. Щоб проілюструвати це, на рис. 7.23(b) показано тривимірний графік лінії критичних точок Ізинґа (7.60) разом із її проєкцією при нульовій температурі на $J_2/J_1 - \Delta h/J_1$ площині. Тут $\Delta h/J_1$ задано різницею значення магнітного поля критичної точки Ізинґа (7.60) і фазового переходу при нульовій температурі між фазами FRI та MD для заданого значення коефіцієнт взаємодії. Рисунок 7.23(b) показує, що цей зсув магнітного поля є від'ємним, $\Delta h/J_1 < 0$, для менших значень $J_2/J_1 < 2$, тоді як він стає додатним у зворотньому випадку $J_2/J_1 > 2$. Ця зміна означає виклика-

не температурою викривлення ліній переходів першого роду до нижчих (вищих) магнітних полів для достатньо малих (великих) значень $J_2/J_1 < 2$ ($J_2/J_1 > 2$). Зауважимо, що подібну поведінку вигину при фазових переходах першого роду було раніше виявлено для кількох фрустрованих спін-1/2 моделей Гайзенберга на основі числових розрахунків [37, 146, 147, 297], тому ми розглянемо цю цікаву особливість більш детально на основі наших точних результатів для розглянутої моделі.

Цікаво з'ясувати, чому лінії фазових переходів першого роду між фазами FRI та MD загинаються або в бік нижчих, або в бік більших магнітних полів. При низькій температурі форма ліній фазових переходів є прямим наслідком кількох низькоенергетичних збуджень. Для глибшого розуміння, зручно почати з діагональної форми локальних гамільтоніанів (7.47) спінових кластерів ромбів:

$$\begin{aligned}
e_{i,j}^h &= J_1 S_{23,i,j}^z (S_{1,i,j}^z + S_{1,i+1,j}^z) + \frac{J_2}{2} S_{23,i,j} (S_{23,i,j} + 1) \\
&\quad - \frac{3J_2}{4} - h S_{23,i,j}^z - \frac{h}{4} (S_{1,i,j}^z + S_{1,i+1,j}^z), \\
e_{i,j}^v &= J_1 S_{45,i,j}^z (S_{1,i,j}^z + S_{1,i,j+1}^z) + \frac{J_2}{2} S_{45,i,j} (S_{45,i,j} + 1) \\
&\quad - \frac{3J_2}{4} - h S_{45,i,j}^z - \frac{h}{4} (S_{1,i,j}^z + S_{1,i,j+1}^z), \tag{7.67}
\end{aligned}$$

які виражаються через квантові спінові числа $\mathbf{S}_{23,i,j} = \mathbf{S}_{2,i,j} + \mathbf{S}_{3,i,j}$ і $\mathbf{S}_{45,i,j} = \mathbf{S}_{4,i,j} + \mathbf{S}_{5,i,j}$, що визначають повний спін димерів та їх z -компонент. Тоді загальну енергію можна отримати як суму всіх енергетичних внесків окремих ромбічних кластерів (7.67).

Фазова діаграма основного стану на рис. 7.20 включає

- фазу MD ($S_{23,i,j} = S_{23,i,j}^z = 0$, $S_{1,i,j}^z = 1/2$) з енергією на ромбічний кластер

$$e_{\text{MD}} = -\frac{3}{4}J_2 - \frac{h}{4}.$$

- фазу FRI ($S_{23,i,j} = S_{23,i,j}^z = 1$, $S_{1,i,j}^z = -1/2$) з енергією на ромбічний кластер

$$e_{\text{FRI}} = \frac{J_2}{4} - J_1 - \frac{3h}{4}.$$

- фази РМ ($S_{23,i,j} = S_{23,i,j}^z = 1, S_{1,i,j}^z = 1/2$) з енергією на ромбічний кластер

$$e_{\text{PM}} = \frac{J_2}{4} + J_1 - \frac{5h}{4}.$$

Тут ми дотримуємося процедури, наведеної в додатку статті [147]. Низькотемпературні термодинамічні властивості визначаються виключно низькоенергетичними збудженнями над основним станом, так що вільну енергію F можна наближено визначити як

$$F \approx E_0 - k_{\text{B}}T \sum_m N_m e^{-\beta \Delta_m}, \quad (7.68)$$

де E_0 позначає енергію основного стану, а Δ_m і N_m позначають енергію і виродження m -го збудження. Якщо розглядати межу між фазами MD і FRI, лінію фазових переходів першого роду отримують з рівності вільних енергій обох фаз, тобто $F_{\text{MD}} = F_{\text{FRI}}$, як у випадку моделі Гайзенберга вище [37].

Задля подальшого розгляду обчислимо збудження з найнижчою енергією над даним основним станом. Спочатку введемо зручне позначення для власних енергій ромбічних спінових кластерів: $E(S_{1,i,j}^z, \{S_{23}, S_{23}^z\}, S_{1,i,j+1}^z)$ та їхні відповідні енергії збудження $\Delta E(S_{1,i,j}^z, \{S_{23}, S_{23}^z\}, S_{1,i,j+1}^z)$. Якщо збуджений стан відноситься до елементарного збудження спіна Ізинга, елементарну енергію збудження слід помножити на коефіцієнт 4, щоб отримати загальний приріст енергії, тобто $\Delta E(S_{1,i,j}^z, \{S_{23}, S_{23}^z\}, S_{1,i,j+1}^z) = 4(E(S_{1,i,j}^z, \{S_{23}, S_{23}^z\}, S_{1,i,j+1}^z) - E_0)$, оскільки кожен спін Ізинга належить чотирьом різним кластерам зі спіном ромбів. Використовуючи рівняння (7.67), можна легко обчислити енергії збуджених станів, а також і відповідні низькоенергетичні збудження у фазі MD: з низькою енергією, що стосуються фази MD:

$$\begin{aligned} \Delta E \left(\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2} \right) &= \frac{h}{4} \times 4 = h, \\ \Delta E \left(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, \frac{1}{2} \right) &= J_1 + J_2 - h, \\ \Delta E \left(\frac{1}{2}, \{1, 0\}, \frac{1}{2} \right) &= J_2. \end{aligned} \quad (7.69)$$

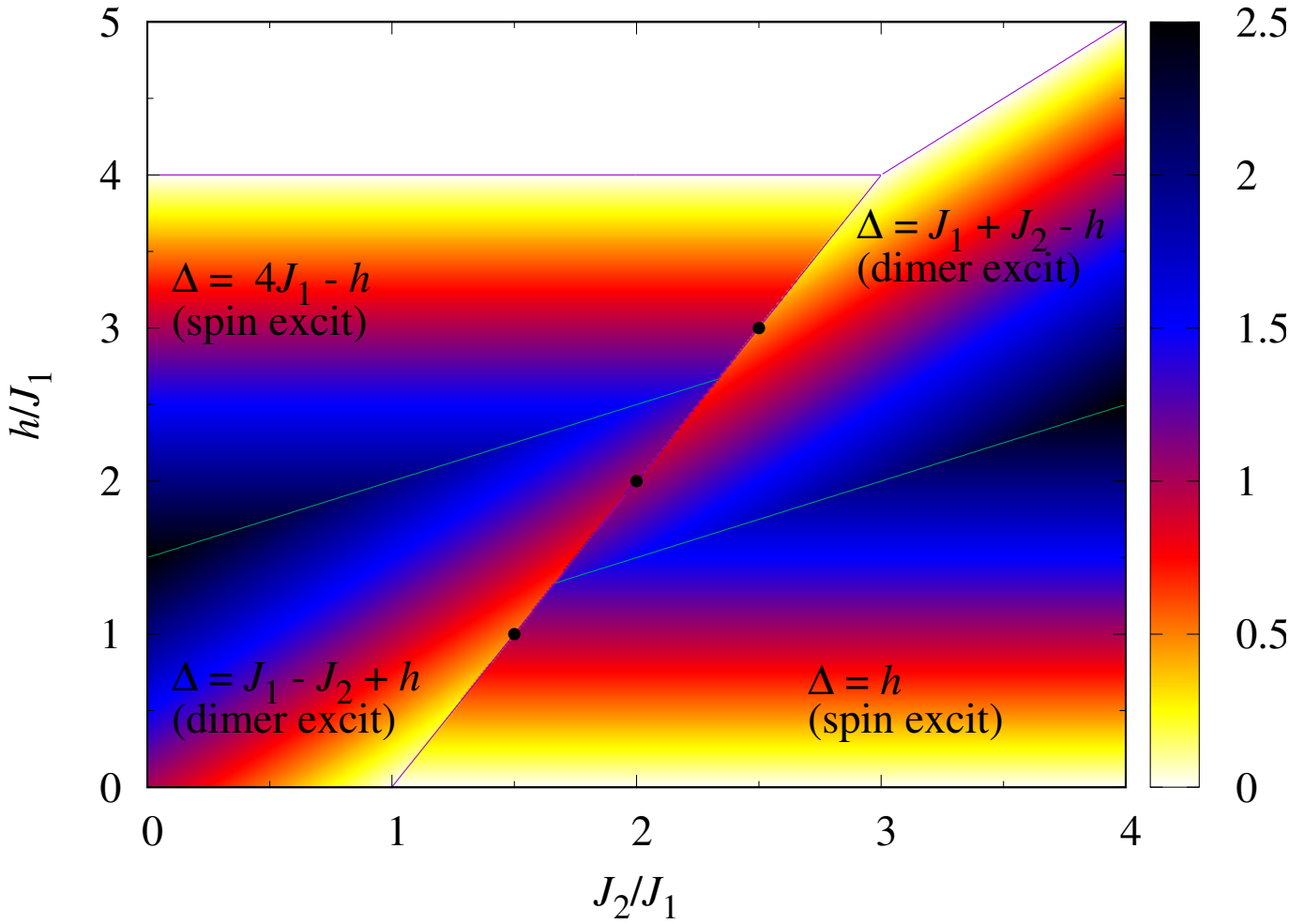


Рис. 7.24. Густина найнижчої енергії збудження над основними станами MD і FRI. Тут “excit” означає збудження.

Енергія збудження $\Delta E(\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2})$ ($\Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, \frac{1}{2})$) є найменшою, якщо $h < h_1$ ($h > h_1$) (див. рис. 7.24), де

$$h_1 = \frac{1}{2}(J_1 + J_2). \quad (7.70)$$

При цьому, h_1 перетинає межу основного стану $h_{\text{MD-FRI}}$ в $J_2/J_1 = 5/3$, $h/J_1 = 4/3$.

З рівняння (7.67) можна знайти енергії низькоенергетичних збуджень у фазі FRI

$$\begin{aligned} \Delta E\left(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, -\frac{1}{2}\right) &= \left(J_1 - \frac{h}{4}\right) \times 4 = 4J_1 - h, \\ \Delta E\left(-\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2}\right) &= J_1 - J_2 + h, \\ \Delta E\left(-\frac{1}{2}, \{1, 0\}, -\frac{1}{2}\right) &= J_1 + h. \end{aligned} \quad (7.71)$$

Як впливає з рівняння (7.71) енергія збудження $\Delta E(-\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2})$ ($\Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, -\frac{1}{2})$) найменша у випадку $h < h_2$ ($h > h_2$) (див. рис. 7.24), де

$$h_2 = \frac{1}{2}(3J_1 + J_2). \quad (7.72)$$

Порівняння з (7.61) показує, що h_2 перетинає межу основного стану $h_{\text{MD-FRI}}$ в точці $J_2/J_1 = 7/3$, $h/J_1 = 8/3$. Поведінка, подібна до моделі Ізинга-Гайзенберга (рис. 7.24), виявляється також у моделі Гайзенберга на декорованій ромбами квадратній ґратці (див. рис. 7.15).

Використовуючи енергії збуджень (7.69) і (7.71), можна легко знайти низькотемпературне наближення для вільної енергії на ромбічний кластер у фазах MD і FRI:

$$f_{\text{MD}} = \frac{F_{\text{MD}}}{2N} \approx e_{\text{MD}} - \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{2} e^{-\beta \Delta E(\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2})} + e^{-\beta \Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, \frac{1}{2})} + e^{-\beta \Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 0\}, \frac{1}{2})} \right), \quad (7.73)$$

$$f_{\text{FRI}} = \frac{F_{\text{FRI}}}{2N} \approx e_{\text{FRI}} - \frac{1}{\beta} \left(\frac{1}{2} e^{-\beta \Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, -\frac{1}{2})} + e^{-\beta \Delta E(-\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2})} + e^{-\beta \Delta E(-\frac{1}{2}, \{1, 0\}, -\frac{1}{2})} \right). \quad (7.74)$$

Зручно знову ввести відхилення магнітного поля від перехідного значення поля між фазами MD і FRI,

$$\Delta h = h - h_{\text{MD-FRI}} = h - 2(J_2 - J_1), \quad (7.75)$$

яке мале при низьких температурах. Далі ми розв'язуємо рівняння $f_{\text{MD}} = f_{\text{FRI}}$, зберігаючи лише члени, лінійні за Δh :

$$\Delta h \approx 2k_{\text{B}}T \left[e^{-\beta(3J_1 - J_2)} + \frac{1}{2} e^{-\beta(2J_2 - 2J_1)} + e^{-\beta J_2} - e^{-\beta(J_2 - J_1)} - \frac{1}{2} e^{-\beta(6J_1 - 2J_2)} - e^{-\beta(2J_2 - J_1)} \right]. \quad (7.76)$$

Цей результат містить внески всіх низькоенергетичних збуджень, заданих рівняннями (7.69) і (7.71). Однак лише деякі з цих внесків залишаються суттєвими

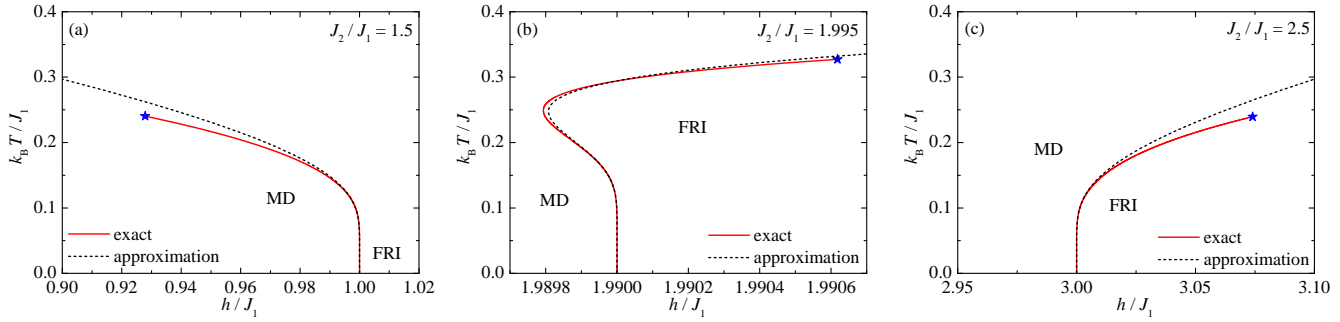


Рис. 7.25. Точні результати та низькотемпературне наближення для температурних ліній фазового переходу першого роду моделі Ізинґа-Гайзенберґа (7.45) для трьох різних значень співвідношення взаємодії: (a) $J_2/J_1 = 1.5$, (b) $J_2/J_1 = 1.995$, (c) $J_2/J_1 = 2.5$.

для конкретних значень магнітного поля та співвідношення взаємодії. На рис. 7.25(a) проілюстровано перший парадигматичний приклад, типовий для області параметрів $J_2/J_1 < 5/3$, для якої найнижче енергетичне збудження у фазі MD $\Delta E(\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2}) = h$ стосується перевероту спіна Ізинґа, тоді як збудження з найнижчою енергією у фазі FRI $\Delta E(-\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2}) = J_1 - J_2 + h$ відповідають димеру Гайзенберґа (див. рис. 7.24). Рівняння (7.76) можна ще більше спростити, зберігши лише два найважливіших доданки, пов'язаних із згаданими вище збудженнями з найнижчою енергією:

$$\Delta h \approx 2k_{\text{B}}T \left[\frac{1}{2}e^{-\beta(2J_2-2J_1)} - e^{-\beta(J_2-J_1)} \right], \quad \frac{J_2}{J_1} < \frac{5}{3}. \quad (7.77)$$

Це рівняння означає, що лінія фазового переходу між фазами FRI та MD загинається до нижчих магнітних полів, $\Delta h < 0$, оскільки найменша енергія збудження у фазі FRI менша, ніж у фазі MD. Цей висновок узгоджується з лініями фазового переходу, зображеними на рис. 7.25(a), завдяки чому низькотемпературне наближення (7.77) правильно відтворює форму точної лінії переходу за досить низьких температур (зверніть увагу, що в межах цього наближення не можливо визначити положення самої критичної точки).

Для другого парадигматичного прикладу, характерного для більшого значення відношення взаємодії $J_2/J_1 > 7/3$, найнижче енергетичне збудження $\Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, \frac{1}{2}) = J_1 + J_2 - h$ димера Гайзенберґа у фазі MD має меншу енергію, ніж збудження з найнижчою енергією $\Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, -\frac{1}{2}) = 4J_1 - h$ спінів Ізинґа

у фазі FRI. Якщо взяти до уваги лише ці два найнижчі енергетичні збудження, формула (7.76) для Δh спрощується до

$$\Delta h \approx 2k_B T \left[e^{-\beta(3J_1 - J_2)} - \frac{1}{2} e^{-\beta(6J_1 - 2J_2)} \right], \frac{J_2}{J_1} > \frac{7}{3}. \quad (7.78)$$

Цей результат показує, що лінія фазових переходів між фазами FRI та MD тепер загинається до більш високих магнітних полів $\Delta h > 0$, оскільки найнижча енергія збудження у фазі FRI вища, ніж у фазі MD. Цей факт пояснює, чому точна лінія фазового переходу, показана на рис. 7.25(с), зміщується в бік вищих магнітних полів відповідно до прогнозу, отриманого за допомогою низькотемпературного наближення (7.78).

Схожі аргументи також можуть бути використані для помірних значень співвідношення взаємодії $5/3 < J_2/J_1 < 7/3$, за винятком окремого випадку, близького до $J_2/J_1 = 2$. За цієї умови найнижче енергетичне збудження у фазах MD та FRI відноситься до елементарного збудження димера Гайзенберга з відповідними енергіями збудження $\Delta E(\frac{1}{2}, \{1, 1\}, \frac{1}{2}) = J_1 + J_2 - h$ і $\Delta E(-\frac{1}{2}, \{0, 0\}, -\frac{1}{2}) = J_1 - J_2 + h$ відповідно. Отже, зумовлені температурою зміни поля переходу між фазами MD і FRI впливають із формули:

$$\Delta h \approx 2k_B T \left[e^{-\beta(3J_1 - J_2)} - e^{-\beta(J_2 - J_1)} \right],$$

$$\frac{5}{3} < \frac{J_2}{J_1} < \frac{7}{3}, \frac{J_2}{J_1} \neq 2. \quad (7.79)$$

яка може бути додатною або від'ємною, залежно від того, чи коефіцієнт взаємодії більший або менший за $J_2/J_1 = 2$ відповідно. Окремий випадок $J_2/J_1 = 2$ є особливим, тому що перше і друге збудження з найнижчою енергією в обох фазах рівні, і їхні внески в рівняння (7.76) компенсуються. Отже, третє найнижче енергетичне збудження димерів Гайзенберга до триплетного стану з нульовою намагніченістю вирішальним чином визначає температурну поведінку зміни магнітного поля Δh :

$$\Delta h \approx 2k_B T \left[e^{-\beta J_2} - e^{-\beta(2J_2 - J_1)} \right], \frac{J_2}{J_1} = 2. \quad (7.80)$$

Очевидно, що найменша енергія збудження $\Delta E\left(\frac{1}{2}, \{1, 0\}, \frac{1}{2}\right) = J_2$ у фазі MD менша ніж $\Delta E\left(-\frac{1}{2}, \{1, 0\}, -\frac{1}{2}\right) = J_1 + h$ у фазі FRI і, отже, лінія фазового переходу між фазами MD і FRI вигинається в бік вищих магнітних полів. Специфічний випадок зі співвідношенням взаємодії $J_2/J_1 \lesssim 2$ навіть набагато складніший через тонку взаємодію між декількома збудженнями низької енергії. Лінія фазового переходу між фазами MD і FRI спочатку згинається при досить низьких температурах у бік нижчих магнітних полів відповідно до формули (7.79), але протилежний вигин у бік вищих магнітних полів виникає при помірних температурах через вирішальну роль третіх найнижчих збуджень димера Гайзенберга до триплетного стану нульової намагніченості. Таким чином, можна зробити висновок, що повторні фазові переходи, які спостерігаються у вузькій області параметрів взаємодії $J_2/J_1 \lesssim 2$, можна віднести до тонкого взаємовпливу всіх трьох збуджень з найнижчою енергією (7.69) і (7.71) над відповідними фазами MD і FRI [див. рис. 7.25(b)].

7.3. Точний розв'язок для двовимірної гібридної моделі локалізованих спінів і колективізованих електронів

Декораційно-ітераційне перетворення застосоване до спінової моделі з декораціями у попередньому підрозділі можна також узагальнити на випадок складніших спін-електронних моделей. Розгляньмо гібридну модель взаємодіючої спін-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці, яка має локалізований спін Ізинґа на кожному нодальному вузлі ґратки і два делокалізовані мобільні електрони на кожній парі декорованих вузлів. Магнітна структура досліджуваної моделі схематично зображена на рис. 7.26. 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

$$\hat{\mathcal{H}}_k = -t \sum_{\alpha=\uparrow,\downarrow} \left(c_{k1,\alpha}^\dagger c_{k2,\alpha} + \text{h.c.} \right) + U \sum_{i=1}^2 n_{ki,\uparrow} n_{ki,\downarrow}$$

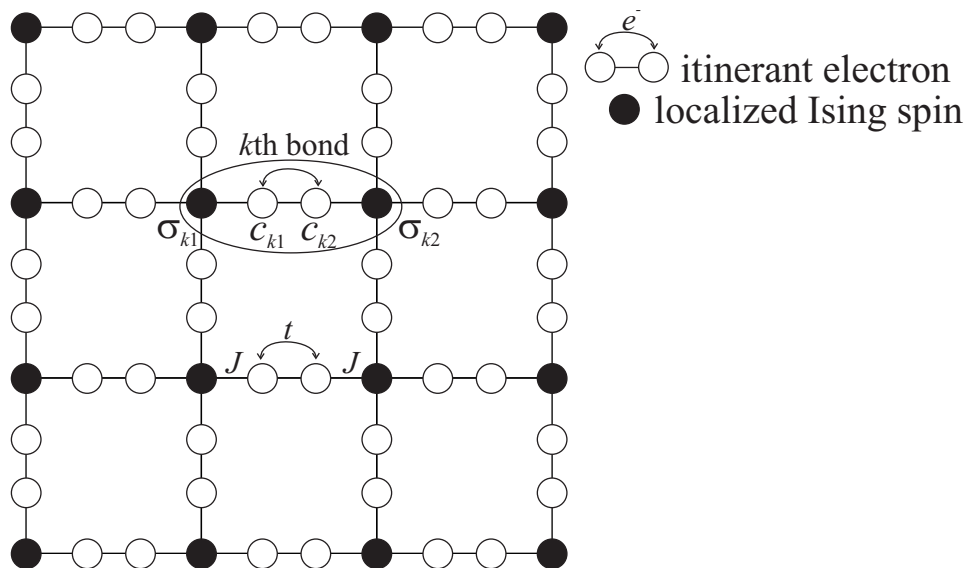


Рис. 7.26. Схематичне зображення подвійно декорованої квадратної ґратки, яка має один локалізований спин Ізинґа на кожному нодальному вузлі ґратки (чорні кружечки) і два рухомих електрони на кожній парі декорованих вузлів (порожні кружечки). Еліпс розмежовує локалізовані спіни Ізинґа та мобільні електрони, описані через гамільтоніан k -го зв'язку (7.81).

$$-\frac{J}{2} \sum_{i=1}^2 \hat{\sigma}_{ki}^z \left(c_{ki,\uparrow}^\dagger c_{ki,\uparrow} - c_{ki,\downarrow}^\dagger c_{ki,\downarrow} \right). \quad (7.81)$$

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 спин-1/2 оператор. Параметр тунелювання t враховує кінетичну енергію рухомих електронів, J описує Ізинґову взаємодію між мобільними електронами та їхніми найближчими Ізинґовими спінами, а $U \geq 0$ позначає Кулонове відштовхування на вузлі.

Випадок $U = 0$ детально розглянуто в нашій статті [30]. Дотримуючись строгого підходу, розробленого там, можна отримати просту універсальну рівність

$$\mathcal{Z}(T, J, t, U) = A^{Nq/2} \mathcal{Z}_{\text{Ising}}(T, R), \quad (7.82)$$

яка встановлює точне відображення між статистичною сумою \mathcal{Z} взаємодіючої спин-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці та статистичною сумою $\mathcal{Z}_{\text{Ising}}$ спин-1/2 моделі Ізинґа на відповідній недекорованій ґратці. Зауважимо, що співвідношення (7.82) дозволяє здійснювати прямі розрахунки всіх

відповідних фізичних величин, які описують магнітну поведінку розглянутої системи.

Перейдемо до обговорення найцікавіших результатів, отриманих для спінелектроної моделі на подвійно декорованій квадратній ґратці з одновузловим Кулоновим відштовхуванням. Спочатку розглянемо окремий випадок цієї гібридної системи без локального відштовхування [30]. Точні результати для цієї конкретної моделі вказують на те, що основний стан системи складається з чотирьох підґраткової квантової антиферромагнітної фази $|AF\rangle$. $|AF\rangle$ з ідеальним порядком Нееля спінів Ізинґа, розташованих у нодальних вузлах ґратки, і з квантовою заплутаністю чотирьох мікростанів $c_{k1,\uparrow}^\dagger c_{k2,\downarrow}^\dagger |0\rangle$, $c_{k1,\downarrow}^\dagger c_{k2,\uparrow}^\dagger |0\rangle$, $c_{k1,\uparrow}^\dagger c_{k1,\downarrow}^\dagger |0\rangle$ і $c_{k2,\uparrow}^\dagger c_{k2,\downarrow}^\dagger |0\rangle$ мобільних електронів, делокалізованих на декораціях ґратки (див. рис. 7.27), амплітуди ймовірностей яких залежать від взаємного співвідношення між тунелюванням t та взаємодією Ізинґа J .

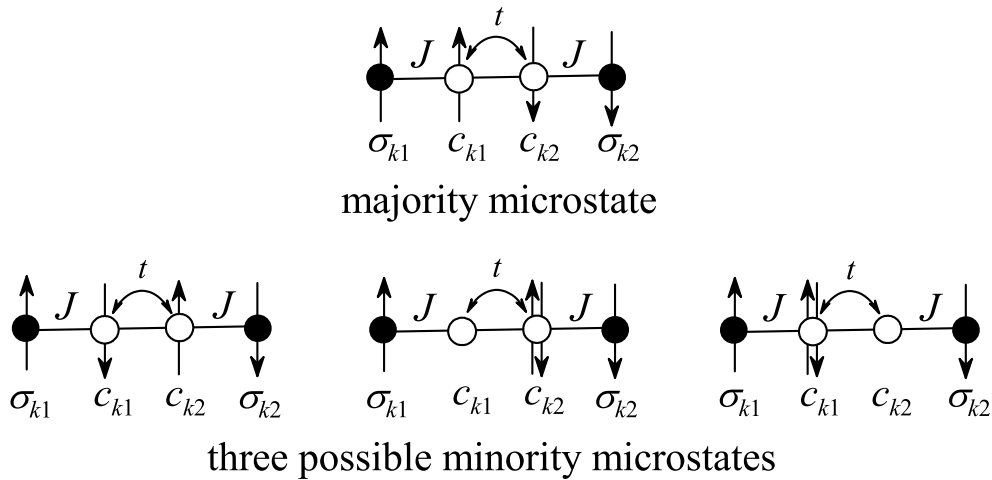


Рис. 7.27. Чотири заплутаних мікростани, які виникають у $|AF\rangle$.

Далі, ми зосередимось на тому, як локальне Кулонове відштовхування $U > 0$ впливає на спонтанний дальній порядок, що виникає в $|AF\rangle$. Для простоти припустимо ферромагнітну взаємодію Ізинґа $J > 0$, тому що зміна знака $J \rightarrow -J$ приносить лише тривіальну зміну взаємної орієнтації нодальних спінів Ізинґа відносно їхніх найближчих сусідніх електронів. Глибше розуміння впливу локального Кулонового відштовхування на розподіл ймовірностей чотирьох заплутаних

мікростанів у $|AF\rangle$ можна отримати з рис. 7.28, який показує ймовірності відповідних мікростанів як функцій U/J для фіксованого $t/J = 1.0$. Як видно звідси,

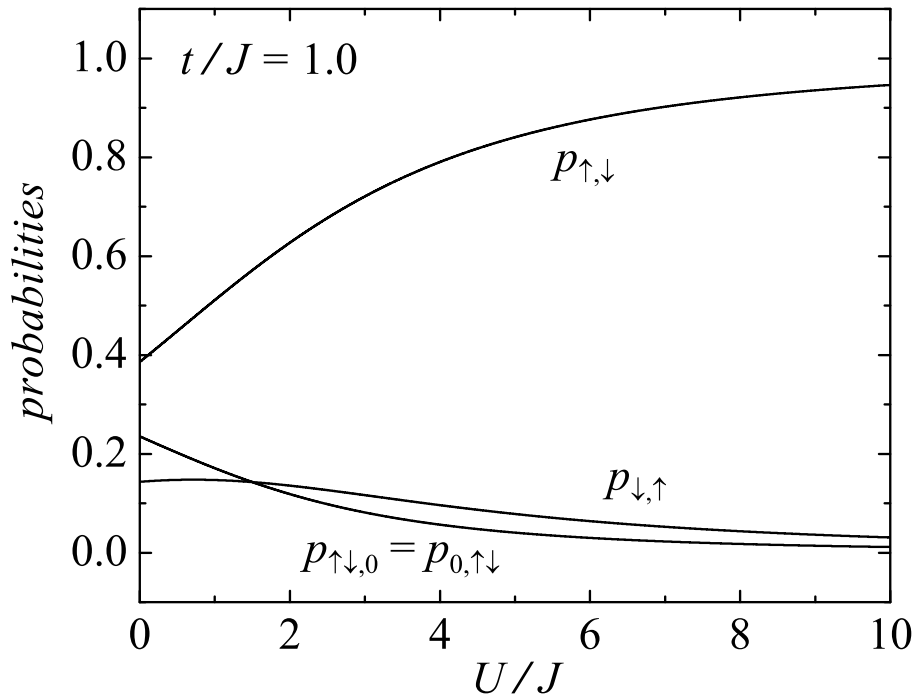


Рис. 7.28. Розподіл імовірності заплутаних мікростанів як функції одновузлового відштовхування для $t/J = 1.0$.

Ймовірність $p_{\uparrow,\downarrow}$ основного мікростану $c_{k1,\uparrow}^\dagger c_{k2,\downarrow}^\dagger |0\rangle$ монотонно зростає при посиленні внутрішнього відштовхування за рахунок ймовірностей $p_{\downarrow,\uparrow}$, $p_{\uparrow,\downarrow,0}$, $p_{0,\uparrow,\downarrow}$ менш заповнених мікростанів, доки вони асимптотично не досягнуть значень $p_{\uparrow,\downarrow} \rightarrow 1$ і $p_{\downarrow,\uparrow} = p_{\uparrow,\downarrow,0} = p_{0,\uparrow,\downarrow} \rightarrow 0$ відповідно в границі $U/J \rightarrow \infty$. Отже, можна зробити висновок, що в межах безмежно сильного локального відштовхування кожен декорований вузол ґратки зайнятий лише одним рухомим електроном, який віддає перевагу феромагнітному вилаштуванню відносно свого найближчого локалізованого спіна. За умови, що в рамках теорії збурень другого порядку кінетичний член t при половинному заповненні еквівалентний антиферомагнітній взаємодії Гайзенберґа між спінами, можна зробити висновок, що для достатньо сильного відштовхування основний стан взаємодіючої спін-електронної системи є ідентичним до спін-1/2 антиферомагнетика Ізинґа-Гайзенберґа, визначеного на тій самій подвійно декорованій ґратці [351].

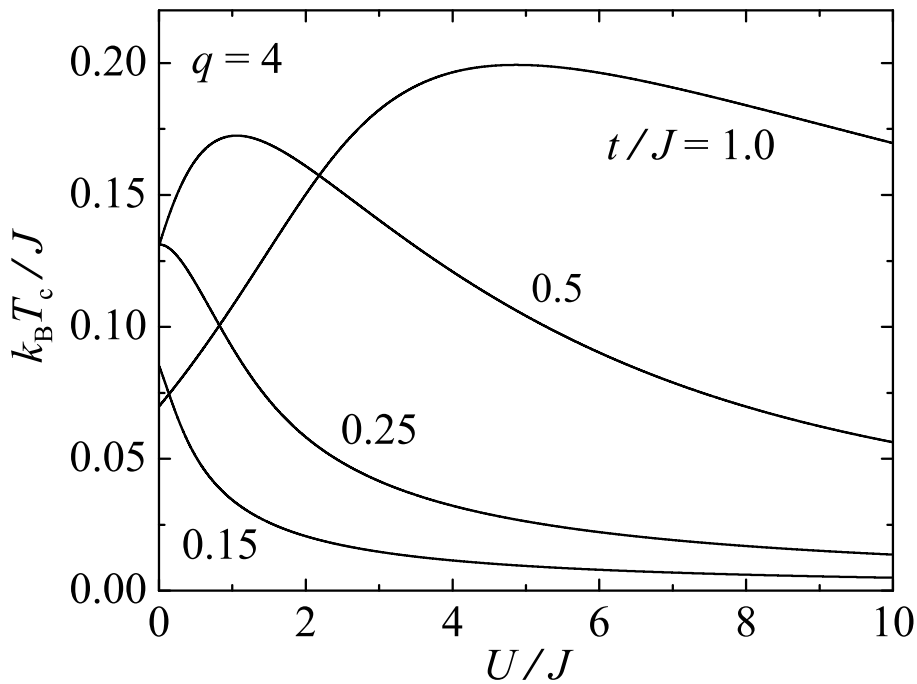


Рис. 7.29. Критична температура взаємодіючої спін-електронної системи на подвійно декорованій квадратній ґратці як функція U/J для кількох значень кінетичного доданка t/J .

На рис. 7.29 зображено критичну температуру спін-електронної моделі на подвійно декорованій квадратній ґратці як функцію Кулонового відштовхування на вузлі для кількох значень кінетичного доданка. Як бачимо, критична температура монотонно зменшується при посиленні кулонівського відштовхування при достатньо малому тунелюванні $t/J \lesssim 0.25$, тоді як для більших значень $t/J \gtrsim 0.25$ вона демонструє чітку залежність із вираженим максимумом через взаємну конкуренцію між сильним тунелюванням t/J та Кулоною взаємодією U/J .

7.4. Висновки

В цьому розділі досліджено ряд квантових спінових моделей та спін-електронну модель, які виявляють складну поведінку не лише в основному стані, а й також при ненульових температурах. За допомогою різноманітних аналітичних та числових методів вивчено фазову діаграму основного стану, процес намагнічення та низькотемпературну термодинаміку спін-1/2 октаедричного лан-

цюжка Гайзенберга [33]. Було продемонстровано, що область сильно фрустрованих параметрів фазової діаграми основного стану може бути точно знайдена в межах варіаційного принципу та підходу локалізованих магнонів, які доводять існування мономер-тетрамерної фази (7.7) і фази локалізованих магнонів (7.13) при низьких і сильних магнітних полях, відповідно. З іншого боку, частина фазової діаграми основного стану, що залишилася, була встановлена за допомогою числових даних методу DMRG для ефективних ланцюжків Гайзенберга зі змішаним спіном. Було виявлено, що модель виявляє в цьому просторі параметрів різноманітні основні стани, які включають три різні квантові феримагнітні фази, дві фази квантової спінової рідини, а також нестандартну синглетну тетрамер-гексамерну фазу (7.28). 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 [36]. Це є важливими для відтворення багатомагнонних станів, відповідальних для правильного опису низькотемпературної термодинаміки спін- $\frac{1}{2}$ ромбічного і октаедричного ланцюжків Гайзенберга. Достовірність і точність розробленого підходу локалізованих магнонів в області сильно фрустрованих параметрів підтверджено шляхом прямого порівняння з числовими даними повної діагоналізації скінченних систем.

Детальне дослідження змішаного спін- $(1,1/2)$ октаедричного ланцюжка Гайзенберга демонструє 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 [35]. Три кластерні фази Голдейна відповідають вищому 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 Гайзенберга 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 мінерального кристала федотовіту [380].

Двовимірні моделі на декорованих ґратках характерні також тим, що квантовий порядок, який встановлюється в основному стані може бути стійким щодо температурних флуктуацій, що дозволяє спостерігати нетипові фазові переходи при ненульових температурах. Тут розглянуто спін-1/2 антиферромагнетик Гайзенберґа у скінченному магнітному полі на квадратній ґратці, декорованій ромбами, використовуючи комбінацію аналітичних підходів, точної діагоналізації, DMRG, а також QMC вільне від проблеми знаку [37]. Встановлено властивості основного стану, 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. 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 таких ліній квантових фазових переходів і лінії критичних точок отримано на основі спін-1/2 моделі Ізинґа-Гайзенберґа на квадратній ґратці, декорованій ромбами [38]. Узагальнене декораційно-ітераційне перетворення забезпечило нам точне відображення вихідної моделі в ефективну спін-1/2 модель Ізинґа на квадратній ґратці, із залежними від температури ефективними взаємодіями найближчих сусідів і магнітним полем. 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.

На завершення, за допомогою узагальненого декоративно-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 чітко показують, що залежність критичної температури від сили локального Кулонового відштовхування в основному залежить від того, чи є кінетичний доданок більшим або меншим за граничне значення $t \approx 0.25J$.

ВИСНОВКИ

Основні висновки та результати проведених досліджень можна сформулювати у вигляді наступних тверджень.

1. Взаємодія Дзялошинського-Морія призводить до нетривіальних змін у динамічних величинах квантових спінів- $1/2$ XU 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 спінів- $1/2$ XU ланцюжків, де неоднорідність задається знаком обмінної взаємодії. Виявлено, що випадковість обмінної взаємодії змінює поведінку xu кореляційних функцій зі степеневі 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 дослі-

джено 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 $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$.
6. Запропоновано теорію збурень за квантовою XU 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 $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ зі складною послідовністю дробових плато, а також до квазіодновимірної сполуки $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$, 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 антиферомагнітного впорядкування від інтегралу переносу та Кулонового відштовхування електронів.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. **Quantum Magnetism** / Ulrich Schollwöck, Johannes Richter, Damian J. J. Farnell, Raymond F. Bishop. Springer Berlin Heidelberg, 2004. Vol. 645 of *Lecture Notes in Physics*.
2. *Lacroix C., Mendels P., Mila F. Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory*. Springer Berlin Heidelberg, 2011. Vol. 164 of *Springer Series in Solid-State Sciences*.
3. The Role of ESR in Research of Low-Dimensional Antiferromagnets / Mitsuhiro Motokawa, Hitoshi Ohta, Hiroyuki Nojiri, Shojiro Kimura // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2003. Vol. 72, no. Suppl.B. P. 1–11.
4. *Ajiro Y. ESR Experiments on Quantum Spin Systems* // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2003. Vol. 72, no. Suppl.B. P. 12–25.
5. *Bramwell S. T. Neutron Scattering and Highly Frustrated Magnetism* // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 45–78.
6. *Zaliznyak I. A., Tranquada J. M. Neutron Scattering and Its Application to Strongly Correlated Systems* // Strongly Correlated Systems: Experimental Techniques / Ed. by Adolfo Avella, Ferdinando Mancini. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2015. P. 205–235.
7. *Miyahara S. Exact Results in Frustrated Quantum Magnetism* // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 513–536.
8. *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.
9. 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.
 10. The effects of the symmetric and antisymmetric anisotropies on the dynamics of the spin-1/2 XY chain / O. Derzhko, T. Verkholyak, T. Krokhamalskii, H. Büttner // *Physica B: Condensed Matter*. 2006. Vol. 378-380. P. 443–444.
 11. Dynamic probes of quantum spin chains with the Dzyaloshinskii-Moriya interaction / Oleg Derzhko, Taras Verkholyak, Taras Krokhamalskii, Helmut Büttner // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73. P. 214407.
 12. 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.
 13. Dynamic properties of quantum spin chains: Simple route to complex behavior / Taras Verkholyak, Oleg Derzhko, Taras Krokhamalskii, Joachim Stolze // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 144418.
 14. Dynamic correlations in a random spin-1/2 XY chain / T. Verkholyak, O. Derzhko, T. Krokhamalskii, J. Stolze // *Acta Physica Polonica A*. 2008. Vol. 113, no. 1. P. 441—444.
 15. 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.
 16. 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.
 17. 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.
 18. 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.
19. 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.
 20. 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.
 21. 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.
 22. 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.
 23. 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.
 24. 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.
 25. 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.
 26. 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.
 27. 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.
28. 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.
29. 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.
30. 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.
31. 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.
32. 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.
33. 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.
34. 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.
35. 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.

36. 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.
37. 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.
38. 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.
39. *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.
40. The effects of the symmetric and antisymmetric anisotropies on the dynamics of the spin- $1/2$ XY chain / O. Derzhko, T. Verkholyak, T. Krokhamalskii, H. Büttner // The International conference on Strongly Correlated Electron Systems SCES05 (July 26-30, 2005, Vienna, Austria). Programme and Abstracts. Vienna, 2005. P. 125.
41. *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.
42. 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.
43. *Verkholyak T., Strečka J., Jaščur M.* Quantum spin- $1/2$ XX model on a dis-

- torted 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.
44. *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.
45. 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.
46. 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.
47. *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.
48. *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.
49. *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.
50. 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.
51. *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.
 52. *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].
 53. *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.
 54. *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.
 55. *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.
 56. *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.
 57. *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 (Slo-

- vakia), June 28–29, 2022. Košice, 2019. P. 16.
58. 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.
 59. *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.
 60. *Diep H. T.* **Frustrated Spin Systems**. World Scientific, 2005.
 61. *Mermin N. D., Wagner H.* Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // *Phys. Rev. Lett.* 1966. Vol. 17. P. 1133–1136.
 62. *Mermin N. D., Wagner H.* Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models // *Phys. Rev. Lett.* 1966. Vol. 17. P. 1307–1307.
 63. *Ruelle D.* Statistical mechanics of a one-dimensional lattice gas // *Communications in Mathematical Physics*. 1968. Vol. 9, no. 4. P. 267–278.
 64. *Araki H.* Gibbs states of a one dimensional quantum lattice // *Communications in Mathematical Physics*. 1969. Vol. 14, no. 2. P. 120–157.
 65. *Savary L., Balents L.* Quantum spin liquids: a review // *Reports on Progress in Physics*. 2016. Vol. 80, no. 1. P. 016502.
 66. *Zhou Y., Kanoda K., Ng T.-K.* Quantum spin liquid states // *Rev. Mod. Phys.* 2017. Vol. 89. P. 025003.
 67. *Lovesey S. W., Balcar E.* The scattering of polarized neutrons by a magnetic material // *Physica B: Condensed Matter*. 1999. Vol. 267-268. P. 221–226.
 68. *Kubo R., Tomita K.* A General Theory of Magnetic Resonance Absorption // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1954. Vol. 9, no. 6. P. 888–919.
 69. *Dzyaloshinsky I.* A thermodynamic theory of “weak” ferromagnetism of anti-

- ferromagnetics // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 1958. Vol. 4, no. 4. P. 241–255.
70. *Moriya T.* Anisotropic Superexchange Interaction and Weak Ferromagnetism // *Phys. Rev.* 1960. Vol. 120. P. 91–98.
 71. *Oshikawa M., Affleck I.* Field-Induced Gap in $S = 1/2$ Antiferromagnetic Chains // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 79. P. 2883–2886.
 72. Effects of the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction on Low-Energy Magnetic Excitations in Copper Benzoate / J. Z. Zhao, X. Q. Wang, T. Xiang, Z. B. Su, L. Yu // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 90. P. 207204.
 73. Two-Stage Spin-Flop Transitions in the $S = 1/2$ Antiferromagnetic Spin Chain $\text{BaCu}_2\text{Si}_2\text{O}_7$ / I. Tsukada, J. Takeya, T. Masuda, K. Uchinokura // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87. P. 127203.
 74. Electron Spin Resonance in the Spin-1/2 Quasi-One-Dimensional Antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya Interaction $\text{BaCu}_2\text{Ge}_2\text{O}_7$ / S. Bertaina, V. A. Pashchenko, A. Stepanov, T. Masuda, K. Uchinokura // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. P. 057203.
 75. *Shiba H., Ueda K., Sakai O.* Effective Hamiltonian for Charge-Ordered Yb_4As_3 // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2000. Vol. 69, no. 5. P. 1493–1497.
 76. Interplay between structure and magnetism in the spin-chain compound $(\text{Cu}, \text{Zn})_2\text{V}_2\text{O}_7$ / J. Pommer, V. Kataev, K.-Y. Choi, P. Lemmens, A. Ionescu, Yu. Pashkevich, A. Freimuth, G. Güntherodt // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 214410.
 77. *Ohta H.* Experimental Studies of Dzyaloshinskii–Moriya Interaction in Quantum Spin Systems: High-frequency High-field Electron Spin Resonance (ESR) Measurements // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2023. Vol. 92, no. 8. P. 081003.
 78. *Katsura H., Nagaosa N., Balatsky A. V.* Spin Current and Magnetoelectric Effect in Noncollinear Magnets // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 057205.
 79. *Antal T., Rácz Z., Sasvári L.* Nonequilibrium Steady State in a Quantum

- System: One-Dimensional Transverse Ising Model with Energy Current // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 78. P. 167–170.
80. Transport in the XX chain at zero temperature: Emergence of flat magnetization profiles / T. Antal, Z. Rácz, A. Rákos, G. M. Schütz // *Phys. Rev. E.* 1999. Vol. 59. P. 4912–4918.
81. *Grynberg M. D., Newman T. J., Stinchcombe R. B.* Exact solutions for stochastic adsorption-desorption models and catalytic surface processes // *Phys. Rev. E.* 1994. Vol. 50. P. 957–971.
82. *Mattis D. C., Glasser M. L.* The uses of quantum field theory in diffusion-limited reactions // *Rev. Mod. Phys.* 1998. Vol. 70. P. 979–1001.
83. *Kontorovich V. M., Tsukernik V. M.* Spiral Structure in a One-dimensional Chain of Spins // *Soviet Journal of Experimental and Theoretical Physics.* 1967. Vol. 25. P. 960.
84. *Mikeska H.-J., Kolezhuk A. K.* **One-dimensional magnetism** // Quantum Magnetism / Ed. by Ulrich Schollwöck, Johannes Richter, Damian J. J. Farnell, Raymond F. Bishop. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2004. P. 1–83.
85. *Richter J., Schulenburg J., Honecker A.* **Quantum magnetism in two dimensions: From semi-classical Néel order to magnetic disorder** // Quantum Magnetism / Ed. by Ulrich Schollwöck, Johannes Richter, Damian J. J. Farnell, Raymond F. Bishop. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2004. P. 85–153.
86. Universal properties of highly frustrated quantum magnets in strong magnetic fields / O. Derzhko, J. Richter, A. Honecker, H.-J. Schmidt // *Low Temperature Physics.* 2007. Vol. 33, no. 9. P. 745–756.
87. Macroscopic Magnetization Jumps due to Independent Magnons in Frustrated Quantum Spin Lattices / J. Schulenburg, A. Honecker, J. Schnack, J. Richter, H.-J. Schmidt // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 88. P. 167207.
88. *Honecker A., Schulenburg J., Richter J.* Magnetization plateaus in frustrated antiferromagnetic quantum spin models // *Journal of Physics: Condensed*

- Matter*. 2004. Vol. 16, no. 11. P. S749.
89. *Haldane F. D. M.* Spontaneous dimerization in the $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnetic chain with competing interactions // *Phys. Rev. B*. 1982. Vol. 25. P. 4925–4928.
 90. *White S. R., Affleck I.* Dimerization and incommensurate spiral spin correlations in the zigzag spin chain: Analogies to the Kondo lattice // *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 54. P. 9862–9869.
 91. *Eggert S.* Numerical evidence for multiplicative logarithmic corrections from marginal operators // *Phys. Rev. B*. 1996. Vol. 54. P. R9612–R9615.
 92. *Majumdar C. K., Ghosh D. K.* On Next-Nearest-Neighbor Interaction in Linear Chain. I // *Journal of Mathematical Physics*. 1969. Vol. 10, no. 8. P. 1388–1398.
 93. *Nomura K., Okamoto K.* Phase Diagram of $S = 1/2$ Antiferromagnetic XXZ Chain with Next-Nearest-Neighbor Interactions // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1993. Vol. 62, no. 4. P. 1123–1126.
 94. Numerical and approximate analytical results for the frustrated spin-1/2 quantum spin chain / R Bursill, G A Gehring, D J J Farnell, J B Parkinson, Tao Xiang, Chen Zeng // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1995. Vol. 7, no. 45. P. 8605.
 95. *Nersesyan A. A., Gogolin A. O., Eßler F. H. L.* Incommensurate Spin Correlations in Spin-1/2 Frustrated Two-Leg Heisenberg Ladders // *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 81. P. 910–913.
 96. *Allen D., Sénéchal D.* Semiclassical description of the frustrated antiferromagnetic chain // *Phys. Rev. B*. 1995. Vol. 51. P. 6394–6401.
 97. *Kolezhuk A. K.* Large-S Approach to Chiral Phases in Frustrated Spin Chains // *Progress of Theoretical Physics Supplement*. 2002. Vol. 145. P. 29–36.
 98. *Shastry B. S., Sutherland B.* Excitation Spectrum of a Dimerized Next-Neighbor Antiferromagnetic Chain // *Phys. Rev. Lett.* 1981. Vol. 47. P. 964–967.

99. Takano K., Kubo K., Sakamoto H. Ground states with cluster structures in a frustrated Heisenberg chain // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1996. Vol. 8, no. 35. P. 6405.
100. Čanová L., Strečka J., Jaščur M. Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising–Heisenberg diamond chains // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2006. Vol. 18, no. 20. P. 4967.
101. Takano K., Suzuki H., Hida K. Exact spin-cluster ground states in a mixed diamond chain // *Phys. Rev. B*. 2009. Vol. 80. P. 104410.
102. Hida K., Takano K., Suzuki H. Finite Temperature Properties of Mixed Diamond Chain with Spins 1 and 1/2 // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2009. Vol. 78, no. 8. P. 084716.
103. Hida K., Takano K., Suzuki H. Haldane Phases and Ferrimagnetic Phases with Spontaneous Translational Symmetry Breakdown in Distorted Mixed Diamond Chains with Spins 1 and 1/2 // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2010. Vol. 79, no. 11. P. 114703.
104. The ground state of an $S = 1/2$ distorted diamond chain - a model of $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ / Kiyomi Okamoto, Takashi Tonegawa, Yutaka Takahashi, Makoto Kaburagi // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1999. Vol. 11, no. 50. P. 10485.
105. Okamoto K., Tonegawa T., Kaburagi M. Magnetic properties of the $S = 1/2$ distorted diamond chain at $T = 0$ // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. Vol. 15, no. 35. P. 5979.
106. Okamoto K., Tokuno A., Ichikawa Y. Ground-state phase diagram of the distorted diamond type $S = 1/2$ quantum spin chain with the XXZ anisotropy // *Journal of Physics and Chemistry of Solids*. 2005. Vol. 66, no. 8. P. 1442–1445. Proceedings of the ISSP International Symposium (ISSP-9) on Quantum Condensed System.
107. Tokuno A., Okamoto K. Inversion Phenomenon and Phase Diagram of the $S = 1/2$ Distorted Diamond Chain with the XXZ Interaction Anisotropy // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2005. Vol. 74, no. Suppl. P. 157–160.

108. Lieb E., Schultz T., Mattis D. Two soluble models of an antiferromagnetic chain // *Annals of Physics*. 1961. Vol. 16, no. 3. P. 407–466.
109. Lieb E., Mattis D. Ordering Energy Levels of Interacting Spin Systems // *Journal of Mathematical Physics*. 1962. Vol. 3, no. 4. P. 749–751.
110. Oshikawa M., Yamanaka M., Affleck I. Magnetization Plateaus in Spin Chains: “Haldane Gap” for Half-Integer Spins // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 78. P. 1984–1987.
111. Experimental Observation of the 1/3 Magnetization Plateau in the Diamond-Chain Compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, H. Ohta // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 227201.
112. Spin Configuration in the 1/3 Magnetization Plateau of Azurite Determined by NMR / F. Aimo, S. Krämer, M. Klanj šek, M. Horvatić, C. Berthier, H. Kikuchi // *Phys. Rev. Lett.* 2009. Vol. 102. P. 127205.
113. 1/3 magnetization plateau observed in the spin-1/2 trimer chain compound $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OH})_2$ / Masashi Hase, Masanori Kohno, Hideaki Kitazawa, Naohito Tsujii, Osamu Suzuki, Kiyoshi Ozawa, Giyuu Kido, Motoharu Imai, Xiao Hu // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73. P. 104419.
114. Direct observation of the energy gap generating the 1/3 magnetization plateau in the spin-1/2 trimer chain compound $\text{Cu}_3(\text{P}_2\text{O}_6\text{OD})_2$ by inelastic neutron scattering measurements / Masashi Hase, Masaaki Matsuda, Kazuhisa Kakurai, Kiyoshi Ozawa, Hideaki Kitazawa, Naohito Tsujii, Andreas Dönni, Masanori Kohno, Xiao Hu // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 064431.
115. Magnetization Process of the $S = 1/2$ and 1 Ferrimagnetic Chain and Dimer / Masayuki Hagiwara, Yasuo Narumi, Kazuhiko Minami, Keiji Tatani, Koichi Kindo // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1999. Vol. 68, no. 7. P. 2214–2217.
116. Magnetization Process of an $S = 1/2$ Tetramer Chain with Ferromagnetic–Ferromagnetic–Antiferromagnetic–Antiferromagnetic Bond Alternating Interactions / Masayuki Hagiwara, Yasuo Narumi, Kazuhiko Minami,

- Koichi Kindo, Hideaki Kitazawa, Hiroyuki Suzuki, Naoto Tsujii, Hideki Abe // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2003. Vol. 72, no. 4. P. 943–946.
117. Novel Alternating Dimer Chain System $(\text{CH}_3)_2\text{NH}_2\text{CuCl}_3$ Studied by X-ray Structural Analyses and Magnetization Process / Yuji Inagaki, Atsushi Kobayashi, Takayuki Asano, Takuo Sakon, Hiroshi Kitagawa, Mitsuhiro Motokawa, Yoshitami Ajiro // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2005. Vol. 74, no. 10. P. 2683–2686.
118. High-field magnetization of $S = 1$ antiferromagnetic bond-alternating chain compounds / Yasuo Narumi, Koichi Kindo, Masayuki Hagiwara, Hiroki Nakano, Akira Kawaguchi, Kouichi Okunishi, Masanori Kohno // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 69. P. 174405.
119. Observation of a magnetization plateau of $1/4$ in a novel double-spin chain of ferromagnetic dimers formed by organic tetraradicals / Tsuneaki Goto, M.I. Bartashevich, Yuko Hosokoshi, Keiichi Kato, Katsuya Inoue // *Physica B: Condensed Matter*. 2001. Vol. 294-295. P. 43–46. Proceedings of the Sixth International Symposium on Research in High Magnetic Fields.
120. *Schulenburg J., Richter J.* Infinite series of magnetization plateaus in the frustrated dimer-plaquette chain // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 65. P. 054420.
121. *Schulenburg J., Richter J.* Sequence of first-order quantum phase transitions in a frustrated spin half dimer-plaquette chain // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. P. 134419.
122. *Sriram Shastry B., Sutherland B.* Exact ground state of a quantum mechanical antiferromagnet // *Physica B+C*. 1981. Vol. 108, no. 1. P. 1069–1070.
123. *Miyahara S., Ueda K.* Theory of the orthogonal dimer Heisenberg spin model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. Vol. 15, no. 9. P. R327–R366.
124. *Koga A., Okunishi K., Kawakami N.* First-order quantum phase transition in the orthogonal-dimer spin chain // *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 62. P. 5558–5563.
125. *Takigawa M., Mila F.* **Magnetization Plateaus** // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix,

Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 241–267.

126. *Abendschein A., Capponi S.* Effective Theory of Magnetization Plateaux in the Shastry-Sutherland Lattice // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 101. P. 227201.
127. *Dorier J., Schmidt K. P., Mila F.* Theory of Magnetization Plateaux in the Shastry-Sutherland Model // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 101. P. 250402.
128. *Nemec M., Foltin G. R., Schmidt K. P.* Microscopic mechanism for the $\frac{1}{8}$ magnetization plateau in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ // *Phys. Rev. B.* 2012. Vol. 86. P. 174425.
129. *Foltin G. R., Manmana S. R., Schmidt K. P.* Exotic magnetization plateaus in a quasi-two-dimensional Shastry-Sutherland model // *Phys. Rev. B.* 2014. Vol. 90. P. 104404.
130. *Corboz P., Mila F.* Crystals of Bound States in the Magnetization Plateaus of the Shastry-Sutherland Model // *Phys. Rev. Lett.* 2014. Vol. 112. P. 147203.
131. Magnetization of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in Ultrahigh Magnetic Fields up to 118 T / 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.* 2013. Vol. 111. P. 137204.
132. *Corboz P., Mila F.* Tensor network study of the Shastry-Sutherland model in zero magnetic field // *Phys. Rev. B.* 2013. Vol. 87. P. 115144.
133. Direct Evidence for the Localized Single-Triplet Excitations and the Dispersive Multitriplet Excitations in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / H. Kageyama, M. Nishi, N. Aso, K. Onizuka, T. Yosihama, K. Nukui, K. Kodama, K. Kakurai, Y. Ueda // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 84. P. 5876–5879.
134. Dispersion and Symmetry of Bound States in the Shastry-Sutherland Model / Christian Knetter, Alexander Bühler, Erwin Müller-Hartmann, Götz S. Uhrig // *Phys. Rev. Lett.* 2000. Vol. 85. P. 3958–3961.
135. *Momoi T., Totsuka K.* Magnetization plateaus of the Shastry-Sutherland model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$: Spin-density wave, supersolid, and bound states // *Phys. Rev. B.* 2000. Vol. 62. P. 15067–15078.
136. *Totsuka K., Miyahara S., Ueda K.* Low-Lying Magnetic Excitation of the

- Shastry-Sutherland Model // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 86. P. 520–523.
137. *Fukumoto Y.* Two-Triplet-Dimer Excitation Spectra in the Shastry-Sutherland Model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ // *Journal of the Physical Society of Japan.* 2000. Vol. 69, no. 9. P. 2755–2758.
138. *Romhányi J., Penc K., Ganesh R.* Hall effect of triplons in a dimerized quantum magnet // *Nature Communications.* 2015. Vol. 6, no. 1. P. 6805.
139. Topological triplon modes and bound states in a Shastry-Sutherland magnet / P. A. McClarty, F. Krüger, T. Guidi, S. F. Parker, K. Refson, A. W. Parker, D. Prabhakaran, R. Coldea // *Nature Physics.* 2017. Vol. 13, no. 8. P. 736–741.
140. *Malki M., Schmidt K. P.* Magnetic Chern bands and triplon Hall effect in an extended Shastry-Sutherland model // *Phys. Rev. B.* 2017. Vol. 95. P. 195137.
141. Field dependence of the quantum ground state in the Shastry-Sutherland system $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / F. Levy, I. Sheikin, C. Berthier, M. Horvatić, M. Takigawa, H. Kageyama, T. Waki, Y. Ueda // *EPL (Europhysics Letters).* 2008. Vol. 81, no. 6. P. 67004.
142. *Wang Z., Batista C. D.* Dynamics and Instabilities of the Shastry-Sutherland Model // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. P. 247201.
143. Specific Heat of the $S=1/2$ Two-Dimensional Shastry–Sutherland Antiferromagnet $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ in High Magnetic Fields / Hiroyuki Tsujii, Costel R. Rotundu, Bohdan Andracka, Yasumasa Takano, Hiroshi Kageyama, Yutaka Ueda // *Journal of the Physical Society of Japan.* 2011. Vol. 80, no. 4. P. 043707.
144. μ^+ SR Investigation of the Shastry-Sutherland Compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / Y. Sassa, S. Wang, J. Sugiyama, A. Amato, H. M. Rønnow, C. Rüegg, M. Månsson // Proceedings of the 14th International Conference on Muon Spin Rotation. 2018. P. 011010.
145. Tensor network study of the $m = \frac{1}{2}$ magnetization plateau in the Shastry-Sutherland model at finite temperature / Piotr Czarnik, Marek M. Rams, Philippe Corboz, Jacek Dziarmaga // *Phys. Rev. B.* 2021. Vol. 103.

P. 075113.

146. A quantum magnetic analogue to the critical point of water / J. Larrea Jiménez, S. P. G. Crone, E. Fogh, M. E. Zayed, R. Lortz, E. Pomjakushina, K. Conder, A. M. Läuchli, L. Weber, S. Wessel, A. Honecker, B. Normand, Ch. Rüegg, P. Corboz, H. M. Rønnow, F. Mila // *Nature*. 2021. Vol. 592, no. 7854. P. 370–375.
147. Thermal Critical Points and Quantum Critical End Point in the Frustrated Bilayer Heisenberg Antiferromagnet / J. Stapmanns, P. Corboz, F. Mila, A. Honecker, B. Normand, S. Wessel // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 121. P. 127201.
148. Richter J., Derzhko O., Krokhamalskii T. Finite-temperature order-disorder phase transition in a frustrated bilayer quantum Heisenberg antiferromagnet in strong magnetic fields // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 74. P. 144430.
149. Thermodynamic properties of $\text{Ba}_2\text{CoSi}_2\text{O}_6\text{Cl}_2$ in a strong magnetic field: Realization of flat-band physics in a highly frustrated quantum magnet / Johannes Richter, Olesia Krupnitska, Vasyl Baliha, Taras Krokhamalskii, Oleg Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 97. P. 024405.
150. Morita K., Shibata N. Exact Nonmagnetic Ground State and Residual Entropy of $S = 1/2$ Heisenberg Diamond Spin Lattices // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2016. Vol. 85, no. 3. P. 033705.
151. Hirose Y., Oguchi A., Fukumoto Y. Exact Realization of a Quantum-Dimer Model in Heisenberg Antiferromagnets on a Diamond-Like Decorated Lattice // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2016. Vol. 85, no. 9. P. 094002.
152. Hirose Y., Oguchi A., Fukumoto Y. Ground States of Spin-1/2 Heisenberg Antiferromagnets with Frustration on a Diamond-Like-Decorated Square Lattice // *J. Phys. Soc. Jpn.* 2017. Vol. 86, no. 1. P. 014002.
153. Ground-state properties of spin-1/2 Heisenberg antiferromagnets with frustration on the diamond-like-decorated square and triangular lattices / Yuhei Hirose, Shoma Miura, Chitoshi Yasuda, Yoshiyuki Fukumoto // *AIP Advances*. 2018. Vol. 8, no. 10. P. 101427.
154. Hirose Y., Oguchi A., Fukumoto Y. Quantum dimer model containing Rokhsar-

- Kivelson point expressed by spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnets // *Phys. Rev. B*. 2020. Vol. 101. P. 174440.
155. Lieb E. H. Two theorems on the Hubbard model // *Phys. Rev. Lett.* 1989. Vol. 62. P. 1201–1204.
156. Kitaev A. Anyons in an exactly solved model and beyond // *Annals of Physics*. 2006. Vol. 321, no. 1. P. 2–111. January Special Issue.
157. He L.-W., Yu S.-L., Li J.-X. Variational Monte Carlo Study of the 1/9-Magnetization Plateau in Kagome Antiferromagnets // *Phys. Rev. Lett.* 2024. Vol. 133. P. 096501.
158. Thermodynamics of the $S = \frac{1}{2}$ hyperkagome-lattice Heisenberg antiferromagnet / Taras Hutak, Taras Krokhmal'skii, Jürgen Schnack, Johannes Richter, Oleg Derzhko // *Phys. Rev. B*. 2024. Vol. 110. P. 054428.
159. Concept and realization of Kitaev quantum spin liquids / Hidenori Takagi, Tomohiro Takayama, George Jackeli, Giniyat Khaliullin, Stephen E. Nagler // *Nature Reviews Physics*. 2019. Vol. 1, no. 4. P. 264–280.
160. Lemmens P., Güntherodt G., Gros C. Magnetic light scattering in low-dimensional quantum spin systems // *Physics Reports*. 2003. Vol. 375, no. 1. P. 1–103.
161. Quasi-1D $S = 1/2$ Antiferromagnet Cs_2CuCl_4 in a Magnetic Field / R. Coldea, D. A. Tennant, R. A. Cowley, D. F. McMorrow, B. Dorner, Z. Tylczynski // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 79. P. 151–154.
162. Spinons in the Strongly Correlated Copper Oxide Chains in SrCuO_2 / I. A. Zaliznyak, H. Woo, T. G. Perring, C. L. Broholm, C. D. Frost, H. Takagi // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 93. P. 087202.
163. Order-to-disorder transition in the XY -like quantum magnet Cs_2CoCl_4 induced by noncommuting applied fields / M. Kenzelmann, R. Coldea, D. A. Tennant, D. Visser, M. Hofmann, P. Smeibidl, Z. Tylczynski // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 65. P. 144432.
164. Quantum spin chains with frustration due to Dzyaloshinskii-Moriya interactions / M. Hälg, W. E. A. Lorenz, K. Yu. Povarov, M. Månsson, Y. Skourski,

- A. Zheludev // *Phys. Rev. B*. 2014. Vol. 90. P. 174413.
165. Electron spin resonance in a model $S = \frac{1}{2}$ chain antiferromagnet with a uniform Dzyaloshinskii-Moriya interaction / A. I. Smirnov, T. A. Soldatov, K. Yu. Povarov, M. Hälg, W. E. A. Lorenz, A. Zheludev // *Phys. Rev. B*. 2015. Vol. 92. P. 134417.
166. Magnetic properties of $\text{Rb}_2\text{Cu}_2\text{Mo}_3\text{O}_{12}$ including a one-dimensional spin-1/2 Heisenberg system with ferromagnetic first-nearest-neighbor and antiferromagnetic second-nearest-neighbor exchange interactions / Masashi Hase, Haruhiko Kuroe, Kiyoshi Ozawa, Osamu Suzuki, Hideaki Kitazawa, Giyuu Kido, Tomoyuki Sekine // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. P. 104426.
167. Magnetic properties of the frustrated diamond chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / Hikomitsu Kikuchi, Yutaka Fujii, Meiro Chiba, Seitaro Mitsudo, Toshitaka Idehara // *Physica B: Condensed Matter*. 2003. Vol. 329-333. P. 967–968. Proceedings of the 23rd International Conference on Low Temperature Physics.
168. Approach to a Single-Component Ferrimagnetism by Organic Radical Crystals / Yuko Hosokoshi, Keiichi Katoh, Yasuhiro Nakazawa, Hiroki Nakano, Katsuya Inoue // *Journal of the American Chemical Society*. 2001. Vol. 123, no. 32. P. 7921–7922.
169. Antiferromagnetic Order in $\text{Bi}_4\text{Cu}_3\text{V}_2\text{O}_{14}$ with Novel Spin Chain / Hiroya Sakurai, Kazuyoshi Yoshimura, Koji Kosuge, Naohito Tsujii, Hideki Abe, Hideaki Kitazawa, Giyuu Kido, Herwig Michor, Gerfried Hilscher // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2002. Vol. 71, no. 4. P. 1161–1165.
170. Uematsu D., Sato M. Magnetic Properties of $\text{Cu}_3(\text{TeO}_3)_2\text{Br}_2$ with Spin 1/2 Diamond Lattice // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2007. Vol. 76, no. 8. P. 084712.
171. A metamagnetic 2D copper(ii)-azide complex with 1D ferromagnetism and a hysteretic spin-flop transition / Gerasimi Lazari, Theocharis C. Stamatatos, Catherine P. Raptopoulou, Vassilis Psycharis, Michael Pissas, Spyros P. Perlepes, Athanassios K. Boudalis // *Dalton Trans.* 2009. P. 3215–3221.

172. High Field ESR Study of the $S = 1/2$ Diamond-Chain Substance $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ up to the Magnetization Plateau Region / Hitoshi Ohta, Susumu Okubo, Tomohisa Kamikawa, Takashi Kunimoto, Yuji Inagaki, Hikomitsu Kikuchi, Takashi Saito, Masaki Azuma, Mikio Takano // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2003. Vol. 72, no. 10. P. 2464–2467.
173. Experimental evidence of the one-third magnetization plateau in the diamond chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Kuwai // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2004. Vol. 272-276. P. 900–901. Proceedings of the International Conference on Magnetism (ICM 2003).
174. Recent high field ESR studies of low-dimensional quantum spin systems in Kobe / Hitoshi Ohta, Susumu Okubo, Yuji Inagaki, Zenji Hiroi, Hikomitsu Kikuchi // *Physica B: Condensed Matter*. 2004. Vol. 346-347. P. 38–44. Proceedings of the 7th International Symposium on Research in High Magnetic Fields.
175. Nature of the Spin Dynamics and $1/3$ Magnetization Plateau in Azurite / K. C. Rule, A. U. B. Wolter, S. Söllow, D. A. Tennant, A. Brühl, S. Köhler, B. Wolf, M. Lang, J. Schreuer // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 100. P. 117202.
176. *Mikeska H.-J., Luckmann C.* Dynamics of a distorted diamond chain // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 054405.
177. Multistep Approach to Microscopic Models for Frustrated Quantum Magnets: The Case of the Natural Mineral Azurite / Harald Jeschke, Ingo Opaale, Hem Kandpal, Roser Valentí, Hena Das, Tanusri Saha-Dasgupta, Oleg Janson, Helge Rosner, Andreas Brühl, Bernd Wolf, Michael Lang, Johannes Richter, Shijie Hu, Xiaoqun Wang, Robert Peters, Thomas Pruschke, Andreas Honecker // *Phys. Rev. Lett.* 2011. Vol. 106. P. 217201.
178. Neutron scattering studies of spin- $1/2$ twofold-period (alternating) and threefold-period quantum antiferromagnetic chains / Masashi Hase, Kiyoshi Ozawa, Hideaki Kitazawa, Naohito Tsujii, Andreas Dönni, Masanori Kohno, Xiao Hu, Masaaki Matsuda, Kazuhisa Kakurai,

- Haruhiko Kuroe // *Journal of Applied Physics*. 2008. Vol. 103, no. 7. P. 07B711.
179. A new homologous series $\text{Sr}_{n-1}\text{Cu}_{n+1}\text{O}_{2n}$ found in the SrO–CuO system treated under high pressure / Z. Hiroi, M. Azuma, M. Takano, Y. Bando // *Journal of Solid State Chemistry*. 1991. Vol. 95, no. 1. P. 230–238.
180. Observation of a Spin Gap in SrCu_2O_3 Comprising Spin- $\frac{1}{2}$ Quasi-1D Two-Leg Ladders / M. Azuma, Z. Hiroi, M. Takano, K. Ishida, Y. Kitaoka // *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 73. P. 3463–3466.
181. Exchange interactions in a novel copper(II) linear-chain compound with ladder-like structure: $\text{Cu}_2(1,4\text{-diazacycloheptane})_2\text{Cl}_4$ / B. Chiari, Olivo Piovesana, T. Tarantelli, P. F. Zanazzi // *Inorganic Chemistry*. 1990. Vol. 29, no. 6. P. 1172–1176.
182. Identification of Nuclear Relaxation Processes in a Gapped Quantum Magnet: ^1H NMR in the $S = \frac{1}{2}$ Heisenberg Ladder $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$ / G. Chaboussant, M.-H. Julien, Y. Fagot-Revurat, L. P. Lévy, C. Berthier, M. Horvati ć, O. Piovesana // *Phys. Rev. Lett.* 1997. Vol. 79. P. 925–928.
183. Nuclear Magnetic Resonance Study of the $S = 1/2$ Heisenberg Ladder $\text{Cu}_2(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N}_2)_2\text{Cl}_4$: Quantum Phase Transition and Critical Dynamics / G. Chaboussant, Y. Fagot-Revurat, M.-H. Julien, M. E. Hanson, C. Berthier, M. Horvati ć, L. P. Lévy, O. Piovesana // *Phys. Rev. Lett.* 1998. Vol. 80. P. 2713–2716.
184. Magnetic Spin Ladder $(\text{C}_5\text{H}_{12}\text{N})_2\text{CuBr}_4$: High-Field Magnetization and Scaling near Quantum Criticality / B. C. Watson, V. N. Kotov, M. W. Meisel, D. W. Hall, G. E. Granroth, W. T. Montfrooij, S. E. Nagler, D. A. Jensen, R. Backov, M. A. Petruska, G. E. Fanucci, D. R. Talham // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 86. P. 5168–5171.
185. Magnetic properties of a molecular-based spin-ladder system: $(5\text{IAP})_2\text{CuBr}_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ / C. P. Landee, M. M. Turnbull, C. Galeriu, J. Giantsidis, F. M. Woodward // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 63. P. 100402.
186. High-Field Magnetization Processes of Double Spin Chain Systems KCuCl_3

- and TlCuCl_3 / Wakako Shiramura, Ken-ichi Takatsu, Hidekazu Tanaka, Kenji Kamishima, Mitsue Takahashi, Hiroyuki Mitamura, Tsuneaki Goto // *Journal of the Physical Society of Japan*. 1997. Vol. 66, no. 7. P. 1900–1903.
187. Field-induced magnetic ordering in the quantum spin system KCuCl_3 / A. Oosawa, T. Takamasu, K. Tatani, H. Abe, N. Tsujii, O. Suzuki, H. Tanaka, G. Kido, K. Kindo // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 66. P. 104405.
188. Magnon Dispersion in the Field-Induced Magnetically Ordered Phase of TlCuCl_3 / Masashige Matsumoto, B. Normand, T. M. Rice, Manfred Sigrist // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 89. P. 077203.
189. *Maekawa S.* Superconductivity in Spin Ladders // *Science*. 1996. Vol. 273, no. 5281. P. 1515–1515.
190. Electronic structure and exchange interactions of the ladder vanadates CaV_2O_5 and MgV_2O_5 / M A Korotin, V I Anisimov, T Saha-Dasgupta, I Dasgupta // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2000. Vol. 12, no. 2. P. 113.
191. Singlet Ground States in an Organic $S = 1/2$ Spin Ladder and a Novel Double Spin Chain of Ferromagnetic Dimers Formed by an Organic Tetraradical / Keiichi Katoh, Yuko Hosokoshi, Katsuya Inoue, Tsuneaki Goto // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2000. Vol. 69, no. 4. P. 1008–1011.
192. Exact Dimer Ground State and Quantized Magnetization Plateaus in the Two-Dimensional Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern, N. V. Mushnikov, K. Onizuka, M. Kato, K. Kosuge, C. P. Slichter, T. Goto, Y. Ueda // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 82. P. 3168–3171.
193. Incomplete Devil's Staircase in the Magnetization Curve of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / M. Takigawa, M. Horvatić, T. Waki, S. Krämer, C. Berthier, F. Lévy-Bertrand, I. Sheikin, H. Kageyama, Y. Ueda, F. Mila // *Phys. Rev. Lett.* 2013. Vol. 110. P. 067210.
194. Fractalization drives crystalline states in a frustrated spin system / Suchitra E. Sebastian, N. Harrison, P. Sengupta, C. D. Batista, S. Francoual, E. Palm, T. Murphy, N. Marcano, H. A. Dabkowska, B. D. Gaulin // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2008. Vol. 105, no. 51. P. 20157–

20160.

195. 4-spin plaquette singlet state in the Shastry–Sutherland compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / M. E. Zayed, Ch. Rüegg, J. Larrea J., A. M. Läuchli, C. Panagopoulos, S. S. Saxena, M. Ellerby, D. F. McMorrow, Th. Strässle, S. Klotz, G. Hamel, R. A. Sadykov, V. Pomjakushin, M. Boehm, M. Jiménez-Ruiz, A. Schneidewind, E. Pomjakushina, M. Stingaciu, K. Conder, H. M. Rønnow // *Nature Physics*. 2017. Vol. 13, no. 10. P. 962–966.
196. Direct Observation of the Quantum Phase Transition of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ by High-Pressure and Terahertz Electron Spin Resonance / Takahiro Sakurai, Yuki Hirao, Keigo Hijii, Susumu Okubo, Hitoshi Ohta, Yoshiya Uwatoko, Kazutaka Kudo, Yoji Koike // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2018. Vol. 87, no. 3. P. 033701.
197. Competition between intermediate plaquette phases in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ under pressure / C. Boos, S. P. G. Crone, I. A. Niesen, P. Corboz, K. P. Schmidt, F. Mila // *Phys. Rev. B*. 2019. Vol. 100. P. 140413.
198. $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ under pressure: A first-principles study / Danis I. Badrtdinov, Alexander A. Tsirlin, Vladimir V. Mazurenko, Frédéric Mila // *Phys. Rev. B*. 2020. Vol. 101. P. 224424.
199. Quantum Phases of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ from High-Pressure Thermodynamics / Jing Guo, Guangyu Sun, Bowen Zhao, Ling Wang, Wenshan Hong, Vladimir A. Sidorov, Nvsen Ma, Qi Wu, Shiliang Li, Zi Yang Meng, Anders W. Sandvik, Liling Sun // *Phys. Rev. Lett.* 2020. Vol. 124. P. 206602.
200. Sign switching of dimer correlations in $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ under hydrostatic pressure / S. Bettler, L. Stoppel, Z. Yan, S. Gvasaliya, A. Zheludev // *Phys. Rev. Research*. 2020. Vol. 2. P. 012010.
201. Far-infrared spectroscopy of spin excitations and Dzyaloshinskii-Moriya interactions in the Shastry-Sutherland compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / T. Rõõm, D. Hüvonen, U. Nagel, J. Hwang, T. Timusk, H. Kageyama // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. P. 144417.
202. *Romhányi J., Totsuka K., Penc K.* Effect of Dzyaloshinskii-Moriya interactions

- on the phase diagram and magnetic excitations of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ // *Phys. Rev. B*. 2011. Vol. 83. P. 024413.
203. Effects of staggered Dzyaloshinskii-Moriya interactions in a quasi-two-dimensional Shastry-Sutherland model / Tianqi Chen, Chu Guo, Pinaki Sengupta, Dario Poletti // *Phys. Rev. B*. 2020. Vol. 101. P. 064417.
204. Construction of Copper Halide Networks within Layered Perovskites. Syntheses and Characterization of New Low-Temperature Copper Oxyhalides / Thomas A. Kodenkandath, Amar S. Kumbhar, Weilie L. Zhou, John B. Wiley // *Inorg Chem*. 2001. Vol. 40, no. 4. P. 710–714.
205. Spin-Singlet Ground State of Two-Dimensional Quantum Spin Antiferromagnet $(\text{CuCl})\text{Ca}_2\text{Nb}_3\text{O}_{10}$ / Yoshihiro Tsujimoto, Atsushi Kitada, Masakazu Nishi, Yasuo Narumi, Koichi Kindo, Tatsuo Goko, Yasutomo J. Uemura, Adam A. Aczel, Travis J. Williams, Graeme M. Luke, Yoshitami Ajiro, Hiroshi Kageyama // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2014. Vol. 83, no. 7. P. 074712.
206. High-field magnetization of TmB_4 / S Yoshii, T Yamamoto, M Hagiwara, A Shigekawa, S Michimura, F Iga, T Takabatake, K Kindo // *Journal of Physics: Conference Series*. 2006. Vol. 51. P. 59–62.
207. Multistep Magnetization Plateaus in the Shastry-Sutherland System TbB_4 / S. Yoshii, T. Yamamoto, M. Hagiwara, S. Michimura, A. Shigekawa, F. Iga, T. Takabatake, K. Kindo // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 101. P. 087202.
208. Fractional Magnetization Plateaus and Magnetic Order in the Shastry-Sutherland Magnet TmB_4 / K. Siemensmeyer, E. Wulf, H.-J. Mikeska, K. Flachbart, S. Gabáni, S. Mat'á š, P. Priputen, A. Efdokimova, N. Shitsevalova // *Phys. Rev. Lett.* 2008. Vol. 101. P. 177201.
209. Spin, charge and lattice dynamics of magnetization processes in frustrated Shastry-Sutherland system TmB_4 / Slavomír Gabáni, Iveta Takáčová, Matúš Orendáč, Gabriel Pristáš, Emil Gažo, Konrad Siemensemeyer, Alexey Bogach, Nikolay Sluchanko, Natalya Shitsevalova, Ján Prokleška, Vladimír Sechovský, Karol Flachbart // *Solid State Sciences*. 2020. Vol. 105.

- P. 106210.
210. *Dublenych Y. I.* Ground States of the Ising Model on the Shastry-Sutherland Lattice and the Origin of the Fractional Magnetization Plateaus in Rare-Earth-Metal Tetraborides // *Phys. Rev. Lett.* 2012. Vol. 109. P. 167202.
 211. *Farkašovský P., Čenčariková H., Mat'aš S.* Numerical study of magnetization processes in rare-earth tetraborides // *Phys. Rev. B.* 2010. Vol. 82. P. 054409.
 212. Exchange Coupling and Energy-Level Crossing in a Magnetic Chain $[\text{Dy}_2\text{Cu}_2]_n$ Evaluated by High-Frequency Electron Paramagnetic Resonance / Atsushi Okazawa, Takashi Nogami, Hiroyuki Nojiri, Takayuki Ishida // *Chemistry of Materials.* 2008. Vol. 20, no. 9. P. 3110–3119.
 213. *de Jongh L., Miedema A.* Experiments on simple magnetic model systems // *Advances in Physics.* 1974. Vol. 23, no. 1. P. 1–260.
 214. *Jensen J., Mackintosh A. R.* **Rare Earth Magnetism: Structures and Excitations.** Oxford University Press, 1991.
 215. *Jordan P., Wigner E.* Über das paulische äquivalenzverbot // *Zeitschrift für Physik.* 1928. Vol. 47, no. 9. P. 631–651.
 216. *Katsura S.* Statistical Mechanics of the Anisotropic Linear Heisenberg Model // *Phys. Rev.* 1962. Vol. 127. P. 1508–1518.
 217. *Siskens T., Capel H., Gaemers K.* On a soluble model of an antiferromagnetic chain with Dzyaloshinsky interactions. I // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.* 1975. Vol. 79, no. 3. P. 259–295.
 218. *Siskens T., Capel H.* On a soluble model of an antiferromagnetic chain with Dzyaloshinsky interactions. II // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications.* 1975. Vol. 79, no. 3. P. 296–311.
 219. *Derzhko O. V., Moina A. P.* Statistical mechanics of one-dimensional $S = 1/2$ anisotropic XY model in transverse field with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // *Condensed Matter Physics.* 1994. no. 3. P. 3–32.
 220. *Derzhko O.* **Jordan-Wigner Fermionization and the Theory of Low-Dimensional Quantum Spin Models: Dynamic Properties** // *Condensed Matter Physics in the Prime of 21st Century: Phenomena* / Ed. by Janusz Jedrzejewski. World

- Scientific, 2008. P. 35–87.
221. *Niemeijer T.* Some exact calculations on a chain of spins $1/2$ // *Physica*. 1967. Vol. 36, no. 3. P. 377–419.
222. Quantum spin dynamics of the antiferromagnetic linear chain in zero and nonzero magnetic field / Gerhard Müller, Harry Thomas, Hans Beck, Jill C. Bonner // *Phys. Rev. B*. 1981. Vol. 24. P. 1429–1467.
223. Quantum spin dynamics of the one-dimensional planar antiferromagnet / G Muller, H Thomas, M W Puga, H Beck // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1981. Vol. 14, no. 23. P. 3399.
224. *Taylor J. H., Müller G.* Magnetic field effects in the dynamics of alternating or anisotropic quantum spin chains // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1985. Vol. 130, no. 1. P. 1–33.
225. *Vaidya H. G., Tracy C. A.* Transverse time-dependent spin correlation functions for the one-dimensional XY model at zero temperature // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1978. Vol. 92, no. 1. P. 1–41.
226. *Caux J.-S., Essler F. H. L., Löw U.* Dynamical structure factor of the anisotropic Heisenberg chain in a transverse field // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 68. P. 134431.
227. *Cruz H. B., Goncalves L. L.* Time-dependent correlations of the one-dimensional isotropic XY model // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1981. Vol. 14, no. 20. P. 2785.
228. *Derzhko O., Krokhmal'skii T., Stolze J.* Dynamics of the spin- $1/2$ isotropic XY chain in a transverse field // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2000. Vol. 33, no. 16. P. 3063.
229. *Brandt U., Jacoby K.* Exact results for the dynamics of one-dimensional spin-systems // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*. 1976. Vol. 25, no. 2. P. 181–187.
230. *Brandt U., Jacoby K.* The transverse correlation function of anisotropic $X - Y$ -chains: Exact results at $T = \infty$ // *Zeitschrift für Physik B Condensed Matter*. 1977. Vol. 26, no. 3. P. 245–252.

231. *Capel H., Perk J.* Autocorrelation function of the x-component of the magnetization in the one-dimensional XY model // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1977. Vol. 87, no. 2. P. 211–242.
232. *Perk J., Capel H.* Time- and frequency-dependent correlation functions for the homogeneous and alternating-isotropic XY models // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1980. Vol. 100, no. 1. P. 1–23.
233. *Derzhko O., Krokhmal'skii T., Stolze J.* Dynamic properties of the dimerized spin-1/2 isotropic XY chain in a transverse field // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 2002. Vol. 35, no. 16. P. 3573.
234. *Suzuki M.* Relationship among Exactly Soluble Models of Critical Phenomena. I – 2D Ising Model, Dimer Problem and the Generalized XY -Model – // *Prog. Theor. Phys.* 1971. Vol. 46, no. 5. P. 1337–1359.
235. *Bulaevskii L. N.* Towards the theory of linear antiferromagnetic chain // *Sov. Phys. JETP*. 1963. Vol. 16. P. 685.
236. *Dmitriev D. V., Krivnov V. Y., Ovchinnikov A. A.* Gap generation in the XXZ model in a transverse magnetic field // *Phys. Rev. B*. 2002. Vol. 65. P. 172409.
237. *Dmitriev D. V., Krivnov V. Y.* Anisotropic Heisenberg chain in coexisting transverse and longitudinal magnetic fields // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. P. 144414.
238. *Nunner T. S., Kopp T.* Jordan-Wigner approach to dynamic correlations in spin ladders // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 69. P. 104419.
239. *Brenig W.* Raman scattering from frustrated quantum spin chains // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. P. 2551–2555.
240. Mean field theory on the incommensurate ground state of the zigzag spin chain / Liqun Sun, Jianhui Dai, Shaojin Qin, Jun Zhang // *Physics Letters A*. 2002. Vol. 294, no. 3. P. 239–244.
241. *Mila F., Schmidt K. P.* **Strong-Coupling Expansion and Effective Hamiltonians** // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Hei-

- delberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 537–559.
242. *Fulde P.* Electron correlations in molecules and solids. Springer Science & Business Media, 2012. Vol. 100.
243. *Avella A., Mancini F.* **Strongly correlated systems: numerical methods.** Springer Science & Business Media, 2013. Vol. 176.
244. *Läuchli A. M.* **Numerical Simulations of Frustrated Systems** // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 481–511.
245. *Weiß A., Fehske H.* **Exact Diagonalization Techniques** // Computational Many-Particle Physics / Ed. by H. Fehske, R. Schneider, A. Weiß. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2008. P. 529–544.
246. *White S. R.* Density matrix formulation for quantum renormalization groups // *Phys. Rev. Lett.* 1992. Vol. 69. P. 2863–2866.
247. *Noack R. M., White S. R.* The Density Matrix Renormalization Group // Density-Matrix Renormalization / Ed. by Ingo Peschel, Matthias Kaulke, Xiaogun Wang, Karen Hallberg. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 1999. P. 27–66.
248. *Schollwöck U.* The density-matrix renormalization group in the age of matrix product states // *Annals of Physics*. 2011. Vol. 326, no. 1. P. 96–192. January 2011 Special Issue.
249. *Sandvik A. W., Kurkijärvi J.* Quantum Monte Carlo simulation method for spin systems // *Phys. Rev. B*. 1991. Vol. 43. P. 5950–5961.
250. *Sandvik A. W.* Stochastic series expansion method with operator-loop update // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. P. R14157–R14160.
251. *Syljuåsen O. F., Sandvik A. W.* Quantum Monte Carlo with directed loops // *Phys. Rev. E*. 2002. Vol. 66. P. 046701.
252. *Troyer M., Wiese U.-J.* Computational Complexity and Fundamental Limitations to Fermionic Quantum Monte Carlo Simulations // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 170201.

253. Easing the Monte Carlo sign problem / Dominik Hangleiter, Ingo Roth, Daniel Nagaj, Jens Eisert // *Science Advances*. 2020. Vol. 6, no. 33. P. eabb8341.
254. *Hen I.* Determining quantum Monte Carlo simulability with geometric phases // *Phys. Rev. Research*. 2021. Vol. 3. P. 023080.
255. Thermodynamic properties of highly frustrated quantum spin ladders: Influence of many-particle bound states / A. Honecker, S. Wessel, R. Kerkdyk, T. Pruschke, F. Mila, B. Normand // *Phys. Rev. B*. 2016. Vol. 93. P. 054408.
256. *Alet F., Damle K., Pujari S.* Sign-Problem-Free Monte Carlo Simulation of Certain Frustrated Quantum Magnets // *Phys. Rev. Lett.* 2016. Vol. 117. P. 197203.
257. Quantum Monte Carlo simulations in the trimer basis: first-order transitions and thermal critical points in frustrated trilayer magnets / L. Weber, A. Honecker, B. Normand, P. Corboz, F. Mila, S. Wessel // *SciPost Phys.* 2022. Vol. 12. P. 054.
258. *Ng K.-K., Yang M.-F.* Field-induced quantum phases in a frustrated spin-dimer model: A sign-problem-free quantum Monte Carlo study // *Phys. Rev. B*. 2017. Vol. 95. P. 064431.
259. Thermodynamic properties of the Shastry-Sutherland model from quantum Monte Carlo simulations / Stefan Wessel, Ido Niesen, Jonas Stapmanns, B. Normand, Frédéric Mila, Philippe Corboz, Andreas Honecker // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 174432.
260. *Affleck I., Oshikawa M.* Field-induced gap in Cu benzoate and other $S = \frac{1}{2}$ antiferromagnetic chains // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 60. P. 1038–1056.
261. *McCoy B. M., Barouch E., Abraham D. B.* Statistical Mechanics of the XY Model. IV. Time-Dependent Spin-Correlation Functions // *Phys. Rev. A*. 1971. Vol. 4. P. 2331–2341.
262. *Lajzerowicz J., Pfeuty P.* Space-time—dependent spin correlation of the one-dimensional Ising model with a transverse field. Application to higher dimensions // *Phys. Rev. B*. 1975. Vol. 11. P. 4560–4562.

263. Müller G., Shrock R. E. Dynamic correlation functions for one-dimensional quantum-spin systems: New results based on a rigorous approach // *Phys. Rev. B*. 1984. Vol. 29. P. 288–301.
264. Correlators in the Heisenberg XXO chain as Fredholm determinants / F. Colomo, A.G. Izergin, V.E. Korepin, V. Tognetti // *Physics Letters A*. 1992. Vol. 169, no. 4. P. 243–247.
265. Colomo F., Izergin A. G., Tognetti V. Correlation functions in the XXO Heisenberg chain and their relations with spectral shapes // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1997. Vol. 30, no. 2. P. 361.
266. Derzhko O., Krokhmal'skii T. Dynamic structure factor of the spin- $\frac{1}{2}$ transverse Ising chain // *Phys. Rev. B*. 1997. Vol. 56. P. 11659–11665.
267. Derzhko O., Krokhmal'skii T. Numerical Approach for the Study of the Spin- $\frac{1}{2}$ XY Chains Dynamic Properties // *physica status solidi (b)*. 1998. Vol. 208, no. 1. P. 221–248.
268. Stolze J., Vogel M. Impurity spin relaxation in $S = \frac{1}{2}$ XX chains // *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 61. P. 4026–4032.
269. Derzhko O., Moina A. 1D $S = 1/2$ anisotropic XY model in transverse field with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // *Ferroelectrics*. 1994. Vol. 153, no. 1. P. 49–54.
270. Perk J., Capel H. Transverse correlations in the inhomogeneous one-dimensional XY model at infinite temperature // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 1978. Vol. 92, no. 1. P. 163–184.
271. Perk J., Capel H. Antisymmetric exchange, canting and spiral structure // *Physics Letters A*. 1976. Vol. 58, no. 2. P. 115–117.
272. Aristov D. N., Maleyev S. V. Spin chirality induced by the Dzyaloshinskii-Moriya interaction and polarized neutron scattering // *Phys. Rev. B*. 2000. Vol. 62. P. R751–R754.
273. Finite-temperature dynamical magnetic susceptibility of quasi-one-dimensional frustrated spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg antiferromagnets / Marc Bocquet, Fabian H. L. Essler, Alexei M. Tsvelik, Alexander O. Gogolin // *Phys. Rev. B*.

2001. Vol. 64. P. 094425.
274. *Derzhko O.* Jordan-Wigner fermionization for spin- $\frac{1}{2}$ systems in two dimensions: a brief review // *J. Phys. Stud.* 2001. Vol. 5, no. 1. P. 49–64.
275. *Somma R. D., Aligia A. A.* Phase diagram of the XXZ chain with next-nearest-neighbor interactions // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 64. P. 024410.
276. *Lecheminant P., Jolicoeur T., Azaria P.* Phase transitions in the one-dimensional spin- S $J_1 - J_2$ XY model // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63. P. 174426.
277. *Zarea M., Fabrizio M., Nersesyan A. A.* Ordered phases of XXZ -symmetric spin- $1/2$ zigzag ladder // *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems.* 2004. Vol. 39, no. 2. P. 155–168.
278. *Fu H. H., Yao K. L., Liu Z. L.* Thermodynamic properties of a spin- $\frac{1}{2}$ diamond chain as a model for a molecule-based ferrimagnet and the compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 73. P. 104454.
279. *Fu H. H., Yao K. L., Liu Z. L.* Erratum: Thermodynamic properties of a spin- $\frac{1}{2}$ diamond chain as a model for a molecule-based ferrimagnet and the compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ [*Phys. Rev. B* 73, 104454 (2006)] // *Phys. Rev. B.* 2008. Vol. 77. P. 219901.
280. *Gu B., Su G.* Magnetism and thermodynamics of spin- $1/2$ Heisenberg diamond chains in a magnetic field // *Phys. Rev. B.* 2007. Vol. 75. P. 174437.
281. *Miyahara S.* **Exact Results in Frustrated Quantum Magnetism** // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 513–536.
282. *Kumar B.* Quantum spin models with exact dimer ground states // *Phys. Rev. B.* 2002. Vol. 66. P. 024406.
283. *Schmidt H.-J.* Spin systems with dimerized ground states // *Journal of Physics A: Mathematical and General.* 2005. Vol. 38, no. 10. P. 2123.
284. Two-dimensional quantum antiferromagnet with a fourfold degenerate dimer ground state / Alain Gellé, Andreas M. Läuchli, Brijesh Kumar,

- Frédéric Mila // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 014419.
285. Schmidt H.-J., Richter J. Exact ground states for coupled spin trimers // *Journal of Physics A: Mathematical and Theoretical*. 2010. Vol. 43, no. 40. P. 405205.
286. Barry J. H., Meisel M. W. Exact solutions in a $S = \frac{1}{2}$ quantum spin ladder model with pair and quartic interactions // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 58. P. 3129–3137.
287. M. T. Batchelor X. W. Guan N. O., Tsuboi Z. Integrable models and quantum spin ladders: comparison between theory and experiment for the strong coupling ladder compounds // *Advances in Physics*. 2007. Vol. 56, no. 3. P. 465–543.
288. Strečka J. Generalized algebraic transformations and exactly solvable classical-quantum models // *Physics Letters A*. 2010. Vol. 374, no. 36. P. 3718–3722.
289. Miyahara S., Ueda K. Exact Dimer Ground State of the Two Dimensional Heisenberg Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ // *Phys. Rev. Lett.* 1999. Vol. 82. P. 3701–3704.
290. Magnetostriction and magnetic texture to 100.75 Tesla in frustrated $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / Marcelo Jaime, Ramzy Daou, Scott A. Crooker, Franziska Weickert, Atsuko Uchida, Adrian E. Feiguin, Cristian D. Batista, Hanna A. Dabkowska, Bruce D. Gaulin // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2012. Vol. 109, no. 31. P. 12404–12407.
291. Misguich G., Jolicoeur T., Girvin S. M. Magnetization Plateaus of $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ from a Chern-Simons Theory // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87. P. 097203.
292. Signatures of a Deconfined Phase Transition on the Shastry-Sutherland Lattice: Applications to Quantum Critical $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / Jong Yeon Lee, Yi-Zhuang You, Subir Sachdev, Ashvin Vishwanath // *Phys. Rev. X*. 2019. Vol. 9. P. 041037.
293. Yang J., Sandvik A. W., Wang L. Quantum criticality and spin liquid phase in the Shastry-Sutherland model // *Phys. Rev. B*. 2022. Vol. 105. P. L060409.

294. Discovery of quantum phases in the Shastry-Sutherland compound $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ under extreme conditions of field and pressure / Zhenzhong Shi, Sachith Dissanayake, Philippe Corboz, William Steinhardt, David Graf, D. M. Silevitch, Hanna A. Dabkowska, T. F. Rosenbaum, Frédéric Mila, Sara Haravifard // *Nature Communications*. 2022. Vol. 13, no. 1. P. 2301.
295. Magnetically Hidden State on the Ground Floor of the Magnetic Devil's Staircase / S. Imajo, N. Matsuyama, T. Nomura, T. Kihara, S. Nakamura, C. Marce-nat, T. Klein, G. Seyfarth, C. Zhong, H. Kageyama, K. Kindo, T. Momoi, Y. Kohama // *Phys. Rev. Lett.* 2022. Vol. 129. P. 147201.
296. Kohama Y. High-Field Calorimetric Studies on Low-Dimensional and Frustrated Quantum Magnets // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2022. Vol. 91, no. 10. P. 101004.
297. Thermal critical points from competing singlet formations in fully frustrated bilayer antiferromagnets / Lukas Weber, Antoine Yves Dimitri Fache, Frédéric Mila, Stefan Wessel // *Phys. Rev. B*. 2022. Vol. 106. P. 235128.
298. Derzhko O., Richter J., Zaburannyi O. Spin-Peierls instability in a quantum spin chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction // *Journal of Physics: Con-densed Matter*. 2000. Vol. 12, no. 40. P. 8661.
299. Choukroun J., Richard J.-L., Stepanov A. High-Temperature Electron Paramagnetic Resonance in Magnets with the Dzyaloshinskii-Moriya Interaction // *Phys. Rev. Lett.* 2001. Vol. 87. P. 127207.
300. Maeda Y., Oshikawa M. Numerical analysis of electron-spin resonance in the spin- $\frac{1}{2}$ XY model // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 224424.
301. Caux J.-S., Maillet J. M. Computation of Dynamical Correlation Functions of Heisenberg Chains in a Magnetic Field // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 95. P. 077201.
302. Sirker J. Spin diffusion and the anisotropic spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg chain // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 73. P. 224424.
303. Random Exchange Heisenberg Chain for Classical and Quantum Spins / A. Furusaki, M. Sigrist, P. A. Lee, K. Tanaka, N. Nagaosa // *Phys. Rev. Lett.* 1994.

Vol. 73. P. 2622–2625.

304. *Hamacher K., Stolze J., Wenzel W.* Disorder Induced Quantum Phase Transition in Random-Exchange Spin-1/2 Chains // *Phys. Rev. Lett.* 2002. Vol. 89. P. 127202.
305. *Jia X., Chakravarty S.* Quantum dynamics of an Ising spin chain in a random transverse field // *Phys. Rev. B.* 2006. Vol. 74. P. 172414.
306. *Nakamura T.* Antiferromagnetic Order in an Ferromagnetic–Antiferromagnetic Random Alternating Quantum Spin Chain: $(\text{CH}_3)_2\text{CHNH}_3\text{Cu}(\text{Cl}_x \text{Br}_{1-x})_3$ // *Journal of the Physical Society of Japan.* 2003. Vol. 72, no. 4. P. 789–792.
307. *Derzhko O., Richter J.* Thermodynamic properties of spin- $\frac{1}{2}$ transverse XY chains with Dzyaloshinskii-Moriya interaction: Exact solution for correlated Lorentzian disorder // *Phys. Rev. B.* 1999. Vol. 59. P. 100–103.
308. *Nunes M. E. S., Florencio J.* Effects of disorder on the dynamics of the XY chain // *Phys. Rev. B.* 2003. Vol. 68. P. 014406.
309. *Hikihara T., Kaburagi M., Kawamura H.* Ground-state phase diagrams of frustrated spin- S XXZ chains: Chiral ordered phases // *Phys. Rev. B.* 2001. Vol. 63. P. 174430.
310. *Nishiyama Y.* Finite-size-scaling analyses of the chiral order in the Josephson-junction ladder with half a flux quantum per plaquette // *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems.* 2000. Vol. 17, no. 2. P. 295–299.
311. *Broeck J.-M. V., Schwartz L. W.* A One-Parameter Family of Sequence Transformations // *SIAM Journal on Mathematical Analysis.* 1979. Vol. 10, no. 3. P. 658–666.
312. *Takahashi M.* Thermodynamics of One-Dimensional Solvable Models. Cambridge University Press, 1999.
313. *Zaspel C. E.* Instability of the trimeric antiferromagnetic chain // *The Journal of Chemical Physics.* 1987. Vol. 86, no. 8. P. 4713–4713.
314. *Okamoto K.* Stability of the $S = 1/2$ trimerized antiferromagnetic XY chain // *Solid State Communications.* 1992. Vol. 83, no. 12. P. 1039–1041.

315. *Okamoto K.* Plateau of the magnetization curve of the $S = 1/2$ ferromagnetic-ferromagnetic-antiferromagnetic spin chain // *Solid State Communications*. 1996. Vol. 98, no. 3. P. 245–248.
316. *Hagemans R., Caux J.-S., Löw U.* Gapped anisotropic spin chains in a field // *Phys. Rev. B*. 2005. Vol. 71. P. 014437.
317. *Tokuno A., Okamoto K.* Inversion Phenomenon and Phase Diagram of the $S = 1/2$ Distorted Diamond Chain with the XXZ Interaction Anisotropy // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2005. Vol. 74, no. Suppl. P. 157–160.
318. *Okamoto K., Tokuno A., Sakai T.* Interplay between the trimerization and frustration in spin-1/2 distorted diamond type spin chain with the XXZ anisotropy // *Journal of Magnetism and Magnetic Materials*. 2007. Vol. 310, no. 2, Part 2. P. e457–e459. Proceedings of the 17th International Conference on Magnetism.
319. Experimental Observation of the $1/3$ Magnetization Plateau in the Diamond-Chain Compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, H. Ohta // *Phys. Rev. Lett.* 2005. Vol. 94. P. 227201.
320. Magnetic Properties of the Diamond Chain Compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ / Hikomitsu Kikuchi, Yutaka Fujii, Meiro Chiba, Seitaro Mitsudo, Toshitaka Idehara, Takashi Tonegawa, Kiyomi Okamoto, Tôru Sakai, Tomohiko Kuwai, Koichi Kindo, Akira Matsuo, Wataru Higemoto, Kusuo Nishiyama, Mladen Horvatić, Claude Berthier // *Progress of Theoretical Physics Supplement*. 2005. Vol. 159. P. 1–10.
321. *Baxter R. J.* Exactly solved models in statistical mechanics. Courier Corporation, 2007.
322. *Pfeuty P.* The one-dimensional Ising model with a transverse field // *Annals of Physics*. 1970. Vol. 57, no. 1. P. 79–90.
323. *Weihong Z., Kotov V., Oitmaa J.* Two-chain spin ladder with frustrating second-neighbor interactions // *Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 57. P. 11439–11445.
324. *Gelfand M. P.* Linked-tetrahedra spin chain: Exact ground state and excita-

- tions // *Phys. Rev. B*. 1991. Vol. 43. P. 8644–8645.
325. Xian Y. Rigorous results on a first-order phase transition in antiferromagnetic spin-1/2 coupled chains // *Phys. Rev. B*. 1995. Vol. 52. P. 12485–12488.
326. Kim E. H., Legeza O., Sólyom J. Topological order, dimerization, and spinon deconfinement in frustrated spin ladders // *Phys. Rev. B*. 2008. Vol. 77. P. 205121.
327. Ramakko B. W., Azzouz M. Effect of temperature on quantum criticality in the frustrated two-leg Heisenberg ladder // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 064419.
328. Azzouz M., Ramakko B. Quantum and classical criticalities in the frustrated two-leg Heisenberg ladder // *Canadian Journal of Physics*. 2008. Vol. 86, no. 4. P. 509–513.
329. Chandra V. R., Surendran N. Exact magnetization plateaus and phase transitions in spin- S Heisenberg antiferromagnets in arbitrary dimensions // *Phys. Rev. B*. 2006. Vol. 74. P. 024421.
330. Bose I., Gayen S. Hole motion in a coupled-chain model: Some exact results // *Phys. Rev. B*. 1993. Vol. 48. P. 10653–10656.
331. Honecker A., Mila F., Troyer M. Magnetization plateaux and jumps in a class of frustrated ladders: A simple route to a complex behaviour // *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*. 2000. Vol. 15, no. 2. P. 227–233.
332. Okazaki N., Miyoshi J., Sakai T. Magnetization Plateau in the Frustrated Spin Ladder // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2000. Vol. 69, no. 1. P. 37–40.
333. Sakai T., Okazaki N. Magnetic properties of frustrated spin ladder // *Journal of Applied Physics*. 2000. Vol. 87, no. 9. P. 5893–5895.
334. Frustration-induced plateaus in $S \geq \frac{1}{2}$ Heisenberg spin ladders / Frédéric Michaud, Tommaso Coletta, Salvatore R. Manmana, Jean-David Picon, Frédéric Mila // *Phys. Rev. B*. 2010. Vol. 81. P. 014407.
335. Rojas O., Strečka J., Lyra M. L. Interplay between spin frustration and ther-

- mal entanglement in the exactly solved Ising–Heisenberg tetrahedral chain // *Physics Letters A*. 2013. Vol. 377, no. 12. P. 920–926.
336. Zhitomirsky M. E. Enhanced magnetocaloric effect in frustrated magnets // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 104421.
337. Zhitomirsky M. E., Honecker A. Magnetocaloric effect in one-dimensional antiferromagnets // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2004. Vol. 2004, no. 07. P. P07012.
338. Honecker A., Wessel S. Magnetocaloric effect in two-dimensional spin-1/2 antiferromagnets // *Physica B: Condensed Matter*. 2006. Vol. 378-380. P. 1098–1099. Proceedings of the International Conference on Strongly Correlated Electron Systems.
339. Schnack J., Schmidt R., Richter J. Enhanced magnetocaloric effect in frustrated magnetic molecules with icosahedral symmetry // *Phys. Rev. B*. 2007. Vol. 76. P. 054413.
340. Fiebig M. Revival of the magnetoelectric effect // *Journal of Physics D: Applied Physics*. 2005. Vol. 38, no. 8. P. R123.
341. Wang Y., Li J., Viehland D. Magnetoelectrics for magnetic sensor applications: status, challenges and perspectives // *Materials Today*. 2014. Vol. 17, no. 6. P. 269–275.
342. Richter J. Localized-magnon states in strongly frustrated quantum spin lattices // *Low Temperature Physics*. 2005. Vol. 31, no. 8. P. 695–703.
343. Derzhko O., Richter J. Finite low-temperature entropy of some strongly frustrated quantum spin lattices in the vicinity of the saturation field // *Phys. Rev. B*. 2004. Vol. 70. P. 104415.
344. Magnetocaloric effect and magnetic cooling near a field-induced quantum-critical point / Bernd Wolf, Yeekin Tsui, Deepshikha Jaiswal-Nagar, Ulrich Tutsch, Andreas Honecker, Katarina Remović-Langer, Georg Hofmann, Andrey Prokofiev, Wolf Assmus, Guido Donath et al. // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2011. Vol. 108, no. 17. P. 6862–6866.
345. Field-induced quantum criticality – application to magnetic cooling /

- Michael Lang, Bernd Wolf, Andreas Honecker, Leon Balents, Ulrich Tutsch, Pham Than Cong, Georg Hofmann, Natalia Krüger, Franz Ritter, Wolf Assmus, Andrey Prokofiev // *physica status solidi (b)*. 2013. Vol. 250, no. 3. P. 457–463.
346. *Ohanyan V., Honecker A.* Magnetothermal properties of the Heisenberg-Ising orthogonal-dimer chain with triangular XXZ clusters // *Phys. Rev. B*. 2012. Vol. 86. P. 054412.
347. *Jensen J., Mackintosh A.* Rare Earth Magnetism: Structures and Excitations. International Series of Monographs on Physics. Clarendon Press, 1991.
348. *Parkinson J. B.* Theory of spin waves in a one-dimensional Heisenberg antiferromagnet // *Journal of Physics C: Solid State Physics*. 1979. Vol. 12, no. 14. P. 2873.
349. *Xian Y.* A microscopic approach to the dimerization in frustrated spin- 1/2 antiferromagnetic chains // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1994. Vol. 6, no. 30. P. 5965.
350. *Tucker J. W.* Generalized Van der Waerden identities // *Journal of Physics A: Mathematical and General*. 1994. Vol. 27, no. 3. P. 659.
351. *Strečka J., Jaščur M.* A brief account of the Ising and Ising-like models: Mean-field, effective-field and exact results // *Acta Physica Slovaca*. 2015. Vol. 65, no. 4. P. 235–367.
352. *Honecker A., Läuchli A.* Frustrated trimer chain model and $\text{Cu}_3\text{Cl}_6(\text{H}_2\text{O})_2 \cdot 2\text{H}_8\text{C}_4\text{SO}_2$ in a magnetic field // *Phys. Rev. B*. 2001. Vol. 63. P. 174407.
353. *Strečka J., Jaščur M.* Existence of a magnetization plateau in a class of exactly solvable Ising–Heisenberg chains // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2003. Vol. 15, no. 26. P. 4519.
354. *Honecker A.* Strong-coupling approach to the magnetization process of polymerized quantum spin chains // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. P. 6790–6794.
355. Dynamic and thermodynamic properties of the generalized diamond chain model for azurite / Andreas Honecker, Shijie Hu, Robert Peters, Jo-

- hannes Richter // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 2011. Vol. 23, no. 16. P. 164211.
356. Frustrated quantum Heisenberg antiferromagnets at high magnetic fields: Beyond the flat-band scenario / Oleg Derzhko, Johannes Richter, Olesia Krupnitska, Taras Krokhmal'skii // *Phys. Rev. B*. 2013. Vol. 88. P. 094426.
357. Eggert S., Affleck I., Takahashi M. Susceptibility of the spin 1/2 Heisenberg antiferromagnetic chain // *Phys. Rev. Lett.* 1994. Vol. 73. P. 332–335.
358. Bonner J. C., Fisher M. E. Linear Magnetic Chains with Anisotropic Coupling // *Phys. Rev.* 1964. Vol. 135. P. A640–A658.
359. Williams T., Kelley C., many others. Gnuplot 4.6: an interactive plotting program. 2013.
360. Dublenych Y. I. Ground states of an Ising model on an extended Shastry-Sutherland lattice and the 1/2-magnetization plateau in some rare-earth-metal tetraborides // *Phys. Rev. E*. 2013. Vol. 88. P. 022111.
361. Schmidt K. P., Uhrig G. S. Excitations in One-Dimensional $S = \frac{1}{2}$ Quantum Antiferromagnets // *Phys. Rev. Lett.* 2003. Vol. 90. P. 227204.
362. Knetter C., Uhrig G. S. Dynamic Structure Factor of the Two-Dimensional Shastry-Sutherland Model // *Phys. Rev. Lett.* 2004. Vol. 92. P. 027204.
363. Novel Ordered Phases in the Orthogonal Dimer Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / Masashi Takigawa, Takeshi Waki, Mladen Horvatić, Claude Berthier // *Journal of the Physical Society of Japan*. 2010. Vol. 79, no. 1. P. 011005.
364. Miyahara S., Ueda K. Thermodynamic Properties of Three-Dimensional Orthogonal Dimer Model for $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ // Proc. Int. Workshop on Magnetic Excitations in Strongly Correlated Electrons. Vol. 69. 2000. P. 72.
365. Emergence of long-range order in sheets of magnetic dimers / S. Haravifard, A. Banerjee, J. van Wezel, D. M. Silevitch, A. M. dos Santos, J. C. Lang, E. Kermarrec, G. Srajer, B. D. Gaulin, J. J. Molaison, H. A. Dabkowska, T. F. Rosenbaum // *Proceedings of the National Academy of Sciences*. 2014. Vol. 111, no. 40. P. 14372–14377.
366. Magnetic Properties and Magnetic Structures of $\text{Cu}_3(\text{OD})_4\text{XO}_4$, $X = \text{Se}$ or

- S: Cycloidal versus Collinear Antiferromagnetic Structure / Serge Vilminot, Gilles André, Françoise Bourée-Vigneron, Mireille Richard-Plouet, Mohamedally Kurmoo // *Inorganic Chemistry*. 2007. Vol. 46, no. 24. P. 10079–10086.
367. A new copper(II) coordination polymer containing chains of interconnected paddle-wheel antiferromagnetic clusters / Sofiane Bouheroum, Aouatef Cherouana, Adel Beghidja, Slimane Dahaoui, Pierre Rabu // *Acta Crystallographica Section C*. 2017. Vol. 73, no. 12. P. 1050–1055.
368. Machado V., Turnbull M. M., Dawe L. N. Structure and Magnetic Properties of a 1D Alternating Cu(II) Monomer—Paddlewheel Chain // *Crystals*. 2018. Vol. 8, no. 3.
369. Mambrini M., Trébosch J., Mila F. Residual entropy and spin gap in a one-dimensional frustrated antiferromagnet // *Phys. Rev. B*. 1999. Vol. 59. P. 13806–13809.
370. Rojas O., Alcaraz F. C. Phase diagram of a coupled tetrahedral Heisenberg model // *Phys. Rev. B*. 2003. Vol. 67. P. 174401.
371. Maksymenko M., Derzhko O., Richter J. Localized states on triangular traps and low-temperature properties of the antiferromagnetic Heisenberg and repulsive Hubbard models // *The European Physical Journal B*. 2011. Vol. 84, no. 3. P. 397–408.
372. Bose I. Exact ground and excited states of an antiferromagnetic quantum spin model // *Journal of Physics: Condensed Matter*. 1989. Vol. 1, no. 46. P. 9267.
373. Derzhko O., Richter J. Universal low-temperature behavior of frustrated quantum antiferromagnets in the vicinity of the saturation field // *The European Physical Journal B - Condensed Matter and Complex Systems*. 2006. Vol. 52, no. 1. P. 23–36.
374. Derzhko O., Richter J., Maksymenko M. Strongly correlated flat-band systems: The route from Heisenberg spins to Hubbard electrons // *International Journal of Modern Physics B*. 2015. Vol. 29, no. 12. P. 1530007.
375. Ivanov N. B. Spin-wave series for quantum one-dimensional ferrimagnets //

- Phys. Rev. B*. 1998. Vol. 57. P. R14024–R14027.
376. *Lhuillier C., Misguich G. Frustrated Quantum Magnets // High Magnetic Fields: Applications in Condensed Matter Physics and Spectroscopy / Ed. by C. Berthier, L. P. Lévy, G. Martinez. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2001. P. 161–190.*
377. *Balents L. Spin liquids in frustrated magnets // Nature. 2010. Vol. 464, no. 7286. P. 199–208.*
378. *Misguich G. Quantum Spin Liquids and Fractionalization // Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Ed. by Claudine Lacroix, Philippe Mendels, Frédéric Mila. Berlin, Heidelberg : Springer Berlin Heidelberg, 2011. P. 407–435.*
379. *Hida K., Takano K. Ground-State Phase Diagram of $S = 1$ Diamond Chains // Journal of the Physical Society of Japan. 2017. Vol. 86, no. 3. P. 033707.*
380. Cluster-Based Haldane State in an Edge-Shared Tetrahedral Spin-Cluster Chain: Fedotovite $\text{K}_2\text{Cu}_3\text{O}(\text{SO}_4)_3$ / M. Fujihala, T. Sugimoto, T. Tohyama, S. Mitsuda, R. A. Mole, D. H. Yu, S. Yano, Y. Inagaki, H. Morodomi, T. Kawae, H. Sagayama, R. Kumai, Y. Murakami, K. Tomiyasu, A. Matsuo, K. Kindo // *Phys. Rev. Lett.* 2018. Vol. 120. P. 077201.
381. Spin triplet ground-state in the copper hexamer compounds $\text{A}_2\text{Cu}_3\text{O}(\text{SO}_4)_3$ ($A = \text{Na}, \text{K}$) / A. Furrer, A. Podlesnyak, E. Pomjakushina, V. Pomjakushin // *Phys. Rev. B*. 2018. Vol. 98. P. 180410.
382. *Strečka J., Karl'ová K. Magnetization curves and low-temperature thermodynamics of two spin-1/2 Heisenberg edge-shared tetrahedra // AIP Advances. 2018. Vol. 8, no. 10. P. 101403.*
383. *Sugimoto T., Morita K., Tohyama T. Cluster-based Haldane states in spin-1/2 cluster chains // Phys. Rev. Res. 2020. Vol. 2. P. 023420.*
384. The ALPS project release 2.0: open source software for strongly correlated systems / B Bauer, L D Carr, H G Evertz, A Feiguin, J Freire, S Fuchs, L Gamper, J Gukelberger, E Gull, S Guertler et al. // *Journal of Statistical Mechanics: Theory and Experiment*. 2011. Vol. 2011, no. 05. P. P05001.

385. *Fisher M. E.* Transformations of Ising Models // *Phys. Rev.* 1959. Vol. 113. P. 969–981.
386. *Rojas O., Valverde J., de Souza S.* Generalized transformation for decorated spin models // *Physica A: Statistical Mechanics and its Applications*. 2009. Vol. 388, no. 8. P. 1419–1430.
387. *Barry J. H., Khatun M., Tanaka T.* Exact solutions for Ising-model even-number correlations on planar lattices // *Phys. Rev. B*. 1988. Vol. 37. P. 5193–5204.
388. *Khatun M., Barry J. H., Tanaka T.* Exact solutions for even-number correlations of the square Ising model // *Phys. Rev. B*. 1990. Vol. 42. P. 4398–4405.
389. *Onsager L.* Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // *Phys. Rev.* 1944. Vol. 65. P. 117–149.

ДОДАТОК А

СПИСОК ПУБЛІКАЦІЙ ЗДОБУВАЧА ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. *Derzhko O., Verkholyak T.* Effects of Dzyaloshinskii-Moriya interaction in the dynamics of $\mathfrak{s} = 1/2$ \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{XY} chain / T. Verkholyak, O. Derzhko, T. Krokhmalkii, 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 \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{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 in-

- terdimer 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 plateaus of a spin-1/2 Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice: effect of quantum \mathbf{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 $\mathbf{s} = 1/2 \mathbf{X}\mathbf{X}$ 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 $\mathbf{X}\mathbf{Y}$ chain / O. Derzhko, T. Verkholyak, T. Krokhamalskii, 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 $\mathbf{J}_1 - \mathbf{J}_2 \mathbf{s} = 1/2 \mathbf{X}\mathbf{X}\mathbf{Z}$ 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 $\mathbf{X}\mathbf{Y}$ 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 $\mathbf{X}\mathbf{X}$ 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 $\mathbf{X}\mathbf{Y}$ 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 \mathbf{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 \mathbf{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 \mathbf{XY} interdimer coupling on the low-field magnetization of the Shastry-Sutherland model // Workshop on Cur-

- rent 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 CS-MAG19 (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 \mathbf{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.

ДОДАТОК Б

АПРОБАЦІЯ РЕЗУЛЬТАТІВ ДИСЕРТАЦІЇ

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); Різдваїні дискусії на ка-

федри 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.