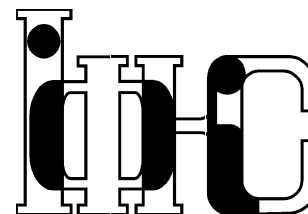


Препринти Інституту фізики конденсованих систем НАН України розповсюджуються серед наукових та інформаційних установ. Вони також доступні по електронній комп'ютерній мережі на WWW-сервері інституту за адресою <http://www.icmp.lviv.ua/>

The preprints of the Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine are distributed to scientific and informational institutions. They also are available by computer network from Institute's WWW server (<http://www.icmp.lviv.ua/>)

Національна академія наук України



ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-10-04U

Б.М. Лісний

СПІН-1/2 ДИСТОРСНИЙ РОМБІЧНИЙ ЛАНЦЮЖОК
ІЗІНГА-ГАББАРДА

Лісний Богдан Михайлович

СПІН-1/2 ДИСТОРСНИЙ РОМБІЧНИЙ ЛАНЦЮЖОК ІЗІНГА-ГАББАРДА

Роботу отримано 22 березня 2010 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом теорії модельних спінових систем

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

ЛЬВІВ

УДК: 536.75, 538.913-405, 538.955-405

PACS: 75.10.-b, 75.10.Pq, 75.40.Cx

Спін-1/2 дисторсний ромбічний ланцюжок Ізінга-Габбарда

Б.М. Лісний

Анотація. Досліджено основний стан і термодинаміку спін-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда з врахуванням однопозиційного кулонівського відштовхування. Методом декораційно-ітераційного перетворення отримано точні результати для вільної енергії, ентропії, теплоємності, намагніченостей ізінгівської і габбардівської підсистем, магнітної сприйнятливості. У випадку геометрично фрустрованої системи вивчено вплив кулонівського відштовхування на основний стан, польову і температурну залежності намагніченості, магнітної сприйнятливості, теплоємності. Сильне відштовхування зумовлює утворення додаткового високотемпературного максимуму теплоємності. Незалежно від наявності відштовхування теплоємність може мати два низькотемпературні максимуми.

Spin-1/2 distorted diamond Ising-Hubbard chain

B.M. Lisnii

Abstract. The ground state and thermodynamics of the spin-1/2 distorted diamond Ising-Hubbard chain with on-site Coulomb repulsion are studied. By means of the decoration-iteration transformation exact results for the free energy, entropy, specific heat, magnetizations of the Ising and Hubbard subsystems, and magnetic susceptibility are obtained. In the case of geometric frustration the effect of the Coulomb repulsion on the ground state, the field and temperature dependencies of the magnetization, magnetic susceptibility, specific heat is analyzed. The strong repulsion leads to the appearance of an additional high-temperature maximum of the specific heat. Independently of the presence of the repulsion, the specific heat may have two low-temperature peaks.

Подається в Фізика низких температур
Submitted to Low Temperature Physics

© Інститут фізики конденсованих систем 2010
Institute for Condensed Matter Physics 2010

Вступ

У статистичній механіці інтерес до одновимірних моделей з регулярною зміною взаємодії між спінами або/і величини спіна викликаний можливістю їх точного розв'язку і застосування до пояснення фізичних властивостей складних реальних систем. Одна з перших такого типу точно розв'язуваних моделей приведена у роботі [1]. Це спін-1/2 ланцюжок Ізінга-Гайзенберга, в якому взаємодія Ізінга чергується з ізотропною взаємодією Гайзенберга. Недавно в цьому ланцюжку розглянуто також випадок анізотропної взаємодії Гайзенберга [2]. Інший цікавий приклад моделі такого типу — це спін-1/2 регулярнозмінний ХУ ланцюжок, точний розв'язок якого отримується застосуванням ферміонізації Йордана-Вігнера і використанням неперервних дробів [3].

На сьогодні відомо багато точно розв'язуваних одновимірних моделей з певним типом структури, творення якої відповідає декоруванню примітивної комірки спін-1/2 ланцюжка Ізінга групою спінів. Декораційні спіни можуть бути зв'язані між собою різними взаємодіями, але з вузловими спінами вони зв'язуються тільки взаємодією Ізінга. Тому вузлові спіни називають спінами Ізінга або ізінгоподібними спінами. Для точного розв'язку таких моделей використовується декораційно-ітераційне перетворення [4, 5]. При розрахунках цим перетворенням можна перейти від декорованого спін-1/2 ланцюжка Ізінга до звичайного спін-1/2 ланцюжка Ізінга з температурозалежними параметрами і після цього використати вже відомі точні результати (наприклад, з [6]). До моделей цього типу належать ланцюжок Ізінга: спін-(1/2, $S > 1/2$) [7], ферромагнітний-ферромагнітний-антиферромагнітний [8], ромбічний [9]; ланцюжок Ізінга-Гайзенберга, де між декораційними спінами діє гайзенбергівська взаємодія: простий [10, 11], ромбічний [12, 13], пілкоподібний [14], тетрадричний [15], з трикутними гайзенбергівськими плакетками [16]. Ці моделі дозволяють вивчати цікаві особливості фізичних характеристик і ефекти: плато намагнічення на проміжних значеннях намагніченості [8–14, 16], додаткові низькотемпературні максимуми теплоємності [7, 9–13, 16], ефект геометричної фрустрації системи [9, 12–16], взаємодію між геометричною фрустрацією і квантовими флуктуаціями [12–16]. Інтерес до цих особливостей і ефектів підсилює те, що вони спостерігаються у реальних системах. Зокрема, вважається, що модель азуриту ($\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$) являє собою ромбічний спіновий ланцюжок Гайзенберга, який належить до фрустрованих антиферромагнітних квантових спінових

ланцюжків [17, 18]. Для опису термодинамічних властивостей $\text{Cu}(\text{3-Chloropyridine})_2(\text{N}_3)_2$ в якості моделі використано тетрамерний ланцюжок Ізінга-Гайзенберга [11].

Недавно у роботі [19] запропоновано нову модель, яка являє собою декорований мобільними електронами ланцюжок Ізінга. Це спін-1/2 дисторсний ромбічний ланцюжок Ізінга-Габбарда без врахування однопозиційного кулонівського відштовхування електронів. У цьому ланцюжку два мобільні електрони здійснюють квантові перескоки між двома міжвузловими позиціями, які знаходяться у протилежних вершинах ромба. Спіни у вузлах і спіни електронів зв'язані між собою вздовж сторін ромба взаємодіями Ізінга. Квантові перескоки електронів, які регулюються правилом Паулі, зумовлюють антиферромагнітну кореляцію між їхніми спінами [19]. Тому при антиферромагнітній взаємодії Ізінга даний ланцюжок являє собою геометрично фрустровану спінову систему, аналогічно як ромбічний ланцюжок Ізінга-Гайзенберга [12, 13]. Ланцюжок Ізінга-Габбарда точно розв'язується декоративно-ітераційним перетворенням без жодних обмежень на модельні параметри. Зауважимо, що якщо б це був дисторсний ромбічний ланцюжок Габбарда, то його точний розв'язок можна отримати значно складнішою процедурою лише при певних умовах для модельних параметрів і для дуже низьких температур [20]. Для дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда без врахування однопозиційного кулонівського відштовхування було досліджено властивості основного стану, процеси намагнічення, температурні залежності намагніченості, магнітної сприйнятливості, теплоємності [19], а також магнітокалоричний ефект [21]. Зокрема, показано, що в процесі намагнічення при нулі температури намагніченість може мати проміжні плато на висотах 0 і 1/3 від намагніченості насичення, і що температурна крива теплоємності має головний і низькотемпературний другорядний максимуми [19].

У цій роботі досліджуються властивості спін-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда [19] з врахуванням однопозиційного кулонівського відштовхування електронів. Методом декоративно-ітераційного перетворення отримуються точні результати для термодинамічних характеристик. У випадку антиферромагнітної взаємодії Ізінга, коли система геометрично фрустрована, вивчається вплив відштовхування на основний стан, процеси намагнічення, температурні залежності сумарної намагніченості, намагніченості ізінгівської і електронної підсистем, магнітної сприйнятливості і теплоємності.

1. Гамільтоніан моделі. Точний розрахунок термодинамічних характеристик

Розглядаємо спін-1/2 дисторсний ромбічний ланцюжок Ізінга-Габбарда у магнітному полі [19]. Примітивна комірка ланцюжка (рис. 1) визначається вузлами k і $k+1$ і містить дві міжвузлові позиції $(k, 1)$ і $(k, 2)$, які разом з вузлами утворюють ромб. Вузли примітивної комірки займають ізінгівські спіни. Дві міжвузлові позиції в примітивній комірці займають два мобільні електрони, які здійснюють квантові перескоки лише між цими позиціями. Між двома електронами на одній позиції діє кулонівське відштовхування. Ізінгівські спіни і спіни сусідніх електронів зв'язані вздовж сторін ромба ізінгівськими взаємодіями. Величина ізінгівських взаємодій на однонаправлених зв'язках однакова, а на різнонаправлених зв'язках різна. Ця асиметрія ізінгівських взаємодій відповідає певній дисторсії ромба. Гамільтоніан \mathcal{H} системи з N примітивних комірок можна представити у вигляді суми по комірках:

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^N \mathcal{H}_k,$$

$$\mathcal{H}_k = \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} t (c_{k,1;\sigma}^\dagger c_{k,2;\sigma} + c_{k,2;\sigma}^\dagger c_{k,1;\sigma}) + \sum_{i=1}^2 U n_{k,i;\uparrow} n_{k,i;\downarrow} + \mu_k (I_1 S_{k,1} + I_2 S_{k,2}) + \mu_{k+1} (I_2 S_{k,1} + I_1 S_{k,2}) - \frac{1}{2} h_i (\mu_k + \mu_{k+1}) - h_e (S_{k,1} + S_{k,2}), \quad (1.1)$$

де гамільтоніан примітивної комірки \mathcal{H}_k містить габбардівський гамільтоніан двох електронів, взаємодію електронних спінів з ізінгівськими спінами і взаємодію спінів примітивної комірки k з магнітним полем. Тут $c_{k,i;\sigma}^\dagger$ і $c_{k,i;\sigma}$ — оператори народження і знищення електрона зі спіном $\sigma = \{\uparrow, \downarrow\}$ на міжвузловій позиції (k, i) , $i = 1, 2$, які задовольняють антикомутаційним співвідношенням; $n_{k,i;\sigma} = c_{k,i;\sigma}^\dagger c_{k,i;\sigma}$ — оператор числа електронів зі спіном σ на позиції (k, i) ; $S_{k,i} = (n_{k,i;\uparrow} - n_{k,i;\downarrow})/2$ — z -компонента оператора сумарного спіна електронів на позиції (k, i) . Змінна μ_k означає z -компоненту спін-1/2 оператора і описує стан ізінгівського спіна на вузлі k . Параметри t і U означають інтеграл перескоку і однопозиційне кулонівське відштовхування електронів, відповідно. Параметри I_1 і I_2 описують ізінгівські взаємодії на різнонаправлених зв'язках (рис. 1). Параметри h_i і h_e описують вплив магнітного поля на ізінгівські і електронні спіни, відповідно.

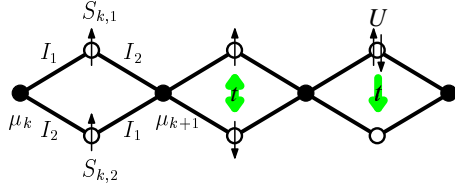


Рис. 1. Схематичне зображення фрагменту спін-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда. У вузлових положеннях примітивної комірки k містяться ізінгівські спіни μ_k і μ_{k+1} . На двох міжвузлових положеннях $(k, 1)$ і $(k, 2)$ примітивної комірки k здійснюються квантові перескоки два мобільні електрони, спіни яких визначають z -компоненту сумарного спіна у цих положеннях: $S_{k,1}$ і $S_{k,2}$.

Знайдемо статистичну суму системи

$$\mathcal{Z} = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H}), \quad \beta = 1/k_B T,$$

де k_B стала Больцмана і T абсолютна температура. Гамільтоніани \mathcal{H}_k комутують між собою, $[\mathcal{H}_k, \mathcal{H}_j] = 0$, тому \mathcal{Z} можна частково факторизувати:

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{\mu\}} \prod_{k=1}^N \text{Tr}_{\{k,1;k,2\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_k), \quad (1.2)$$

де $\text{Tr}_{\{\mu\}}$ означає слід по станах ізінгівських спінів, а $\text{Tr}_{\{k,1;k,2\}}$ означає слід по станах двох електронів комірки k .

Розрахуємо слід оператора $\exp(-\beta \mathcal{H}_k)$ по електронних станах

$$\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1}) = \text{Tr}_{\{k,1;k,2\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_k),$$

який залежить від ізінгівських спінів μ_k і μ_{k+1} . Для цього переходимо до матричного представлення операторів $c_{k,i;\sigma}^\dagger$ і $c_{k,i;\sigma}$ в базисі, побудованому зі станів двох електронів комірки:

$$\begin{aligned} |\uparrow, \uparrow\rangle &= c_{k,1;\uparrow}^\dagger c_{k,2;\uparrow}^\dagger |0\rangle, & |\downarrow, \downarrow\rangle &= c_{k,1;\downarrow}^\dagger c_{k,2;\downarrow}^\dagger |0\rangle, & |\uparrow, \downarrow\rangle &= c_{k,1;\uparrow}^\dagger c_{k,2;\downarrow}^\dagger |0\rangle, \\ |\downarrow, \uparrow\rangle &= -c_{k,1;\downarrow}^\dagger c_{k,2;\uparrow}^\dagger |0\rangle, & |\uparrow, \downarrow, 0\rangle &= c_{k,1;\uparrow}^\dagger c_{k,1;\downarrow}^\dagger |0\rangle, & |0, \uparrow\downarrow\rangle &= c_{k,2;\uparrow}^\dagger c_{k,2;\downarrow}^\dagger |0\rangle, \end{aligned}$$

де позначення станів таке саме як у роботі [19]. В результаті отримуємо матрично-операторний вигляд \mathcal{H}_k :

$$\mathcal{H}_k = h_{11} \oplus (-h_{11}) \oplus \begin{pmatrix} h_{33} & 0 & t & t \\ 0 & -h_{33} & t & t \\ t & t & U & 0 \\ t & t & 0 & U \end{pmatrix} - \frac{1}{2} h_i (\mu_k + \mu_{k+1}) \mathbf{1}, \quad (1.3)$$

де

$$h_{11} = \frac{1}{2}(I_1 + I_2)(\mu_k + \mu_{k+1}) - h_e, \quad h_{33} = \frac{1}{2}(I_1 - I_2)(\mu_k - \mu_{k+1}),$$

$\mathbf{1}$ – одинична матриця. Знаходимо власні значення матриці \mathcal{H}_k :

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_1(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \frac{1}{2}(I_1 + I_2)(\mu_k + \mu_{k+1}) - h_e - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\ \mathcal{E}_2(\mu_k, \mu_{k+1}) &= -\frac{1}{2}(I_1 + I_2)(\mu_k + \mu_{k+1}) + h_e - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\ \mathcal{E}_3(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \Lambda_1 |\mu_k - \mu_{k+1}| - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\ \mathcal{E}_4(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \frac{1}{2} \left(U - \sqrt{U^2 + 16t^2} \right) |\mu_k + \mu_{k+1}| + \Lambda_2 |\mu_k - \mu_{k+1}| - \\ &\quad - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\ \mathcal{E}_5(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \frac{1}{2} \left(U + \sqrt{U^2 + 16t^2} \right) |\mu_k + \mu_{k+1}| + \Lambda_3 |\mu_k - \mu_{k+1}| - \\ &\quad - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\ \mathcal{E}_6(\mu_k, \mu_{k+1}) &= U - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \end{aligned} \quad (1.4)$$

де Λ_i – це власні значення матриці

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{I_1 - I_2}{2} & 0 \\ \frac{I_1 - I_2}{2} & 0 & 2t \\ 0 & 2t & U \end{pmatrix}.$$

Нарешті, отримуємо $\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1}) = \sum_{i=1}^6 e^{-\beta \mathcal{E}_i(\mu_k, \mu_{k+1})}$.

Робимо декоративно-ітераційне перетворення $\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1})$ [4, 5, 19]:

$$\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1}) = A \exp[\beta R \mu_k \mu_{k+1} + \beta h_0 (\mu_k + \mu_{k+1}) / 2], \quad (1.5)$$

де A , R і h_0 параметри перетворення. Вони визначаються такими співвідношеннями:

$$\begin{aligned} A &= \left[\mathcal{Z}_k \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \mathcal{Z}_k \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \mathcal{Z}_k^2 \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \right]^{\frac{1}{4}}, \\ \beta R &= \frac{1}{4} \ln \left[\mathcal{Z}_k \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \mathcal{Z}_k \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \mathcal{Z}_k^{-2} \left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \right], \\ \beta h_0 &= \frac{1}{2} \ln \left[\mathcal{Z}_k \left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2} \right) \mathcal{Z}_k^{-1} \left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right) \right]. \end{aligned}$$

За допомогою цього перетворення обчислення статистичної суми ланцюжка Ізінга-Габбарда (1.2) зводиться до обчислення статистичної суми ланцюжка Ізінга з взаємодією R і магнітним полем h_0 :

$$\mathcal{Z} = A^N \text{Tr}_{\{\mu\}} \prod_{k=1}^N \exp[\beta R \mu_k \mu_{k+1} + \beta h_0 (\mu_k + \mu_{k+1})/2]. \quad (1.6)$$

Використовуємо відомий результат для статистичної суми ланцюжка Ізінга [6]

$$\text{Tr}_{\{\mu\}} \prod_{k=1}^N \exp[\beta R \mu_k \mu_{k+1} + \beta h_0 (\mu_k + \mu_{k+1})/2] = \lambda_1^N + \lambda_2^N,$$

де

$$\lambda_{1,2} = \exp\left(\frac{\beta R}{4}\right) \text{ch}\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) \pm \sqrt{\exp\left(\frac{\beta R}{2}\right) \text{sh}^2\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) + \exp\left(-\frac{\beta R}{2}\right)},$$

і отримуємо статистичну суму ланцюжка Ізінга-Габбарда

$$\mathcal{Z} = A^N (\lambda_1^N + \lambda_2^N).$$

Вільна енергія, що припадає на одну примітивну комірку (3 спіни), в термодинамічній границі має такий вигляд:

$$f = \lim_{N \rightarrow \infty} -\frac{\ln \mathcal{Z}}{\beta N} = -\frac{1}{\beta} \ln A - \frac{1}{\beta} \ln \lambda_1. \quad (1.7)$$

З цієї вільної енергії розраховуємо ентропію s і теплоємність c :

$$s = k_B \beta^2 \left(\frac{\partial f}{\partial \beta}\right)_{h_i, h_e}, \quad c = -\beta \left(\frac{\partial s}{\partial \beta}\right)_{h_i, h_e}.$$

Розрахунок намагніченості $m_i = \frac{1}{2} \langle \mu_k + \mu_{k+1} \rangle$ і кореляційної функції $q_{ii}(n) = \langle \mu_k \mu_{k+n} \rangle$ ізінгівських спінів ланцюжка Ізінга-Габбарда зводиться до розрахунку цих же характеристик для ланцюжка Ізінга з взаємодією R і магнітним полем h_0 . Тому для m_i і $q_{ii}(n)$ використовуємо відомі результати [6]:

$$m_i = \frac{\text{sh}\left(\frac{\beta h_0}{2}\right)}{2\sqrt{\text{sh}^2\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) + e^{-\beta R}}}, \quad q_{ii}(n) = \frac{\text{sh}^2\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) + \left(\frac{\lambda_2}{\lambda_1}\right)^n e^{-\beta R}}{4\left(\text{sh}^2\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) + e^{-\beta R}\right)}.$$

Намагніченість електронної підсистеми $m_e = \frac{1}{2} \langle S_{k,1} + S_{k,2} \rangle$ отримується диференціюванням статистичної суми \mathcal{Z} у вигляді (1.6) по параметру h_e [22]. Таким чином розрахунок намагніченості m_e зводиться до диференціювання по параметру h_e параметрів декоративно-ітераційного перетворення (1.5):

$$m_e = \frac{1}{2\beta} \left(\frac{1}{A} \frac{\partial A}{\partial h_e} + q_{ii}(1) \frac{\partial(\beta R)}{\partial h_e} + m_i \frac{\partial(\beta h_0)}{\partial h_e} \right).$$

Знайшовши m_i і m_e , визначаємо сумарну намагніченість ланцюжка

$$m = (m_i + 2m_e)/3.$$

Зауважимо, що в процесах намагнічення всі намагніченості m_i , m_e і m матимуть однакоке значення насичення $m_s = 1/2$. Магнітна сприйнятливість на дію магнітного поля h має таку структуру:

$$\chi = \frac{dm}{dh} = \frac{1}{3} \left(\frac{\partial m_i}{\partial h_i} \frac{dh_i}{dh} + \frac{\partial m_i}{\partial h_e} \frac{dh_e}{dh} \right) + \frac{2}{3} \left(\frac{\partial m_e}{\partial h_i} \frac{dh_i}{dh} + \frac{\partial m_e}{\partial h_e} \frac{dh_e}{dh} \right).$$

На цьому завершуємо розгляд основних моментів і результатів аналітичного розрахунку термодинамічних характеристик ланцюжка Ізінга-Габбарда.

2. Числові результати і їх обговорення

Переходимо до представлення і обговорення числових результатів. В отриманих аналітичних результатах ізінгівська взаємодія може бути феромагнітною або антиферомагнітною. Розглянемо лише випадок антиферомагнітної ізінгівської взаємодії ($I_1, I_2 \geq 0$), в якому система геометрично фрустрована. Не обмежуючи загальності, покладемо $I_1 \geq I_2$ і введемо різницю ізінгівських взаємодій $\Delta I = I_1 - I_2$ [19]. Параметри впливу магнітного поля на ізінгівські і електронні спіни беремо однаковими: $h_i = h_e = h$. Щоб зменшити число вільних параметрів моделі, переходимо так само як у роботі [19] до безрозмірних параметрів:

$$\tilde{t} = \frac{t}{I_1}, \quad \tilde{U} = \frac{U}{I_1}, \quad \tilde{h} = \frac{h}{I_1}, \quad \Delta \tilde{I} = \frac{\Delta I}{I_1},$$

де $I_1 \neq 0$. Параметр $\Delta \tilde{I}$ має фізичний зміст в області $0 \leq \Delta \tilde{I} \leq 1$ і характеризує ступінь асиметрії ізінгівських взаємодій для прийнятого

типу дисторсії ромба: від випадку наявності у них ромбічної симетрії, коли $\Delta\tilde{I} = 0$, до випадку наявності у них граничного відхилення від ромбічної симетрії, коли $\Delta\tilde{I} = 1$.

Спочатку розглянемо властивості системи в основному стані. Основний стан визначаємо шляхом пошуку найменшої енергії у спектрі гамільтоніана примітивної комірки (1.4) при усіх можливих значеннях μ_k і μ_{k+1} . Енергії (1.4) у безрозмірній формі $\tilde{\mathcal{E}}_i(\mu_k, \mu_{k+1}) = \mathcal{E}_i(\mu_k, \mu_{k+1})/I_1$ є функціями чотирьох параметрів моделі: \tilde{t} , \tilde{U} , $\Delta\tilde{I}$, \tilde{h} . В результаті проведеного пошуку основного стану виявилось, що в залежності від значень цих чотирьох параметрів моделі основним станом можуть бути такі самі чотири стани як у випадку відсутності кулонівського відштовхування [19], а саме: насичений парамагнітний стан SPA, феримагнітний стан FRI, ненасичений парамагнітний стан UPA і вузловий антиферомагнітний стан NAF (рис. 2). Наводимо безрозмірні енергії цих станів у розрахунку на примітивну комірку:

$$\begin{aligned}\tilde{\mathcal{E}}_{\text{SPA}} &= 1 - \frac{\Delta\tilde{I}}{2} - \frac{3\tilde{h}}{2}; \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\text{FRI}} &= -1 + \frac{\Delta\tilde{I}}{2} - \frac{\tilde{h}}{2}; \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}} &= \frac{\tilde{U} - \sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2}}{2} - \frac{\tilde{h}}{2}; \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}} &= \min\{\tilde{\Lambda}_i, i = 1, 2, 3\},\end{aligned}\quad (2.1)$$

де $\tilde{\Lambda}_i$ — це власні значення матриці $\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L}/I_1$ з безрозмірними елементами. Цим станам відповідають такі хвильові функції:

$$\begin{aligned}|\text{SPA}\rangle &= \prod_{k=1}^N |+\rangle_k |\uparrow, \uparrow\rangle_{k,1;k,2}, \\ |\text{FRI}\rangle &= \prod_{k=1}^N |-\rangle_k |\uparrow, \uparrow\rangle_{k,1;k,2}, \\ |\text{UPA}\rangle &= \prod_{k=1}^N |+\rangle_k [\Psi_{\text{UPA}}]_{k,1;k,2}, \\ |\text{NAF}\rangle &= \prod_{k=1}^N \left| (- \right)^{n=\{k+1\}} \rangle_k [\Psi_{\text{NAF}}^{(-)n}]_{k,1;k,2},\end{aligned}$$

де вектори $|\pm\rangle_k$ описують стан ізінгівських спінів μ_k : $|+\rangle = |\uparrow\rangle$, $|-\rangle = |\downarrow\rangle$; вираз $(-)^n \in \{+, -\}$ означає знак, який співпадає зі

знаком числа $(-1)^n$;

$$\begin{aligned}\Psi_{\text{UPA}} &= A_{\text{UPA}} \left(|\uparrow, \downarrow\rangle + |\downarrow, \uparrow\rangle \right) + B_{\text{UPA}} \left(|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle \right), \\ \Psi_{\text{NAF}}^- &= A_{\text{NAF}}^- |\uparrow, \downarrow\rangle + A_{\text{NAF}}^+ |\downarrow, \uparrow\rangle + B_{\text{NAF}} \left(|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle \right), \\ \Psi_{\text{NAF}}^+ &= A_{\text{NAF}}^+ |\uparrow, \downarrow\rangle + A_{\text{NAF}}^- |\downarrow, \uparrow\rangle + B_{\text{NAF}} \left(|\uparrow\downarrow, 0\rangle + |0, \uparrow\downarrow\rangle \right);\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}A_{\text{UPA}} &= \frac{\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}} - \tilde{U}}{\sqrt{2} \sqrt{(\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}} - \tilde{U})^2 + 4\tilde{t}^2}}, & B_{\text{UPA}} &= \frac{\sqrt{2} \tilde{t}}{\sqrt{(\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}} - \tilde{U})^2 + 4\tilde{t}^2}}, \\ A_{\text{NAF}}^\pm &= \frac{\left(\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}} \pm \frac{1}{2} \Delta\tilde{I} \right) (\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}} - \tilde{U})}{\sqrt{2\Phi_{\text{NAF}}}}, & B_{\text{NAF}} &= \frac{2\tilde{t}\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}}}{\sqrt{2\Phi_{\text{NAF}}}}, \\ \Phi_{\text{NAF}} &= \left(\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}}^2 + \frac{1}{4} \Delta\tilde{I}^2 \right) (\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}} - \tilde{U})^2 + 4\tilde{t}^2 \tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}}^2.\end{aligned}$$

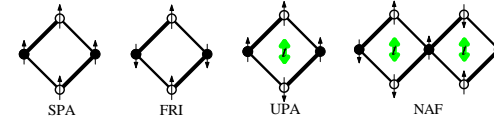


Рис. 2. Схематичне зображення конфігурації спінів у примітивній комірці для чотирьох основних станів. Товщина сторін ромба відображає умову $I_1 > I_2$.

Розглянемо фазову діаграму основного стану в площині $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Її вигляд визначають параметри \tilde{t} і \tilde{U} . В залежності від них чотири основні стани SPA, FRI, UPA і NAF утворюють такі самі як без відштовхування [19] три типові фазові діаграми (рис. 3). Перша типова фазова діаграма (рис. 3,а), на якій представлені три основні стани FRI, NAF і SPA, реалізується при умові

$$\tilde{t} \leq \frac{1}{4} \sqrt{1 + 2\tilde{U}}.$$

Друга типова фазова діаграма (рис. 3,б), на якій представлені чотири основні стани FRI, NAF, UPA і SPA, реалізується при умові

$$\frac{1}{4} \sqrt{1 + 2\tilde{U}} < \tilde{t} < \frac{1}{2} \sqrt{1 + \tilde{U}}.$$

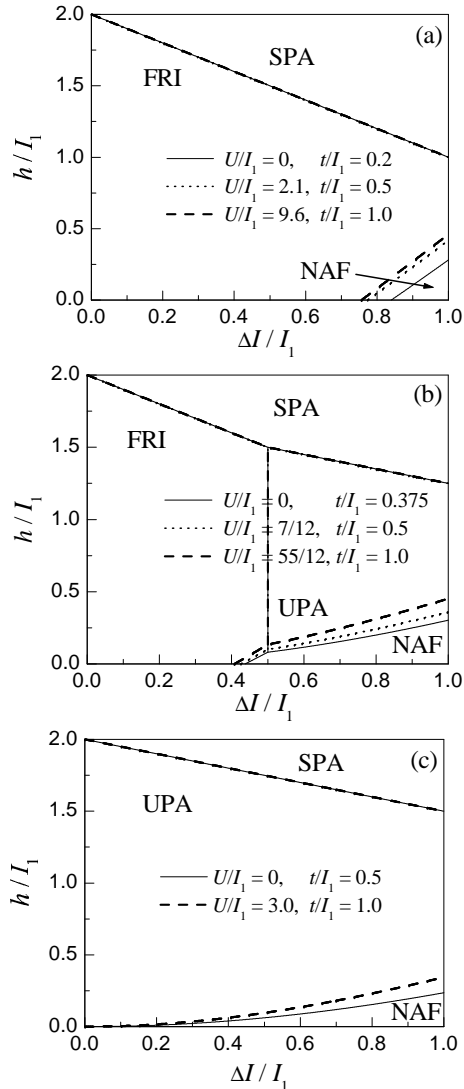


Рис. 3. Фазова діаграма основного стану ($\Delta\tilde{I}$, \tilde{h}). Три можливі типові діаграми: (a), (b), (c). У випадку $\tilde{U} = 0$ представлені тут результати співпадають з відповідними результатами роботи [19]. Для кожного типу фазової діаграми показано лінії співіснування станів при кількох наборах значень параметрів \tilde{U} і \tilde{t} .

Лінія співіснування станів FRI і UPA задається співвідношенням $\Delta\tilde{I} = \Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}$, де

$$\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}} = \tilde{U} - \sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} + 2.$$

При нулі магнітного поля основні стани FRI і NAF співіснують у точці $\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}}$, яка визначається з трансцендентного рівняння

$$\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}} - 2 - 2\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}} = 0.$$

Третя типова фазова діаграма (рис. 3,c), на якій представлені три основні стани NAF, UPA і SPA, реалізується при умові

$$\frac{1}{2}\sqrt{1 + \tilde{U}} \leq \tilde{t}.$$

Бачимо, що зміна типу фазової діаграми основного стану в залежності від параметрів \tilde{t} і \tilde{U} полягає у витісненні станом UPA стану FRI, чи навпаки (рис. 3). Якщо у вказаних вище співвідношеннях, які характеризують вигляд фазової діаграми, покласти $\tilde{U}=0$, то вони співпадуть з відповідними співвідношеннями роботи [19]. Якісне обговорення типових фазових діаграм основного стану можна знайти у роботі [19]. Ми його доповнимо обговоренням цікавих властивостей основного стану, які проявляються при певних умовах.

Почнемо з властивостей основного стану на лінії співіснування станів FRI і SPA: $\tilde{h}=2-\Delta\tilde{I}$. На цій лінії крім станів FRI і SPA основним станом також є вузловий антиферромагнітний стан NAF_+ : $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}_+} = -\tilde{h}$,

$$|\text{NAF}_+\rangle = \prod_{k=1}^N \left| (-)^{\{k+1\}_k} \mid \uparrow, \uparrow \rangle_{k,1;k,2} \right.$$

В результаті цього поведінка ізінгівської підсистеми на цій лінії описується такими характеристиками:

$$\beta R = \beta h_0 = 0, \quad m_i = 0, \quad q_{ii}(n) = 0. \quad (2.2)$$

Це свідчить про те, що ізінгівські спіни є ефективно вільними, тобто вони можуть з однаковою ймовірністю перебувати у двох своїх станах: $\mid \uparrow \rangle$ і $\mid \downarrow \rangle$. При цьому міжвузлові пари електронів перебувають у стані $\mid \uparrow, \uparrow \rangle$. У геометрично фрустрованих системах Ізінга-Гайзенберга є основні стани типу мономер-димер, в яких спіни Ізінга поведуться вільно, а пари міжвузлових спінів Гайзенберга перебувають у певному сплутаному стані, і називають ці основні стани фрустрованими (FRU) [12–14]. Використовуючи цю термінологію даний

основний стан може бути ідентифікований як фрустрований феромагнітний стан

$$|\text{FRU}_+\rangle = \prod_{k=1}^N |\pm\rangle_k |\uparrow, \uparrow\rangle_{k,1;k,2}.$$

У стані FRU_+ всі спіни напівкласично впорядковані. Цим він відрізняється від виявлених в системах Ізінга-Гайзенберга [12–14] фрустрованих станів, в яких пари спінів Гайзенберга перебувають у сплутаному стані. Ця відмінність пов'язана з тим, що у намагніченому фрустрованому стані FRU_+ стан міжвузлової пари спінів зумовлений магнітним полем, а виявлені в роботах [12–14] фрустровані стани реалізуються при нулі магнітного поля і в них стан міжвузлової пари спінів зумовлений квантовими флуктуаціями. Вільна поведінка ізінгівських спінів створює макроскопічне виродження стану FRU_+ , тому він має залишкову ентропію $s_{\text{res}}=k_B \ln 2$. До речі, таку саму залишкову ентропію має основний стан на лінії співіснування станів UPA і SPA [21]. Але тут макроскопічне виродження зумовлене поведінкою пари міжвузлових електронів, яка з однаковою ймовірністю може перебувати у двох станах: $|\uparrow, \uparrow\rangle$ і Ψ_{UPA} .

У точці $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, 2 - \Delta\tilde{I}_{\text{F|U}})$, де закінчується лінія співіснування основних станів FRI і SPA, основний стан системи вже відмінний від FRU_+ . У цій точці сходяться три лінії співіснування основних станів: лінія співіснування станів FRI і SPA, лінія співіснування станів FRI і UPA, і лінія співіснування станів UPA і SPA. Таким чином, тут співіснують чотири основні стани: FRI, SPA, NAF_+ і UPA. Поведінка ізінгівської підсистеми описується такими параметрами:

$$R = h_0=0, \quad \beta R = \beta h_0 = \ln 2, \quad m_i = \frac{m_s}{\sqrt{5}}, \quad q_{ii}(n) = \frac{1}{20} + \frac{1}{5} \left(\frac{3 - \sqrt{5}}{3 + \sqrt{5}} \right)^n.$$

Це свідчить про те, що поведінка ізінгівських спінів не є вільною. Відсутність вільної поведінки ізінгівських спінів при параметрах $R = h_0 = 0$ пояснюється наявністю у температурних залежностях параметрів R і h_0 лінійної складової, вплив якої ізінгівські спіни відчувають навіть в границі $T \rightarrow 0$. Цей основний стан макроскопічно вироджений і має більшу ніж стан FRU_+ залишкову ентропію $s_{\text{res}}=k_B \ln[(3 + \sqrt{5})/2]$.

Розглянемо властивості основного стану системи у точці $\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}}$, де співіснують три стани: FRI, FRI_{in} , який інверсний по z -компонентах всіх спінів до стану FRI, і NAF . У цьому основному стані ізінгівські спіни поведуться вільно згідно до типових для фрустрованих станів співвідношень (2.2), а стан міжвузлової пари електро-

нів визначається станами сусідніх ізінгівських спінів і рівномірно може бути одним з чотирьох станів: $|\uparrow, \uparrow\rangle$, $|\downarrow, \downarrow\rangle$, Ψ_{NAF}^- і Ψ_{NAF}^+ . Загалом електронна підсистема не намагнічена: $m_e = 0$. Цей основний стан макроскопічно вироджений і має типове для фрустрованих станів значення залишкової ентропії: $s_{\text{res}}=k_B \ln 2$. Незважаючи на таку подібність цього основного стану до фрустрованих станів, те, що у ньому стан міжвузлової пари електронів залежить від станів сусідніх ізінгівських спінів, не характерно для фрустрованих станів [12–14], зокрема для стану FRU_+ .

По-суті такі самі властивості як у точці $\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}}$ основний стан системи має у точці $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, \tilde{h}_{\text{F|N|U}})$, де $\tilde{h}_{\text{F|N|U}}=\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}} - 2 - 2\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}}$. У цій точці основний стан формується трьома станами: FRI, UPA і NAF . У цьому основному стані ізінгівські спіни поведуться вільно згідно характеристик (2.2), а стан міжвузлової пари електронів визначається станом сусідніх ізінгівських спінів і рівномірно може бути одним з чотирьох станів: $|\uparrow, \uparrow\rangle$, Ψ_{UPA} , Ψ_{NAF}^- , Ψ_{NAF}^+ . Електронна підсистема має намагніченість: $m_e=m_s/4$. Цей основний стан макроскопічно вироджений: $s_{\text{res}}=k_B \ln 2$.

Коли точки $\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}}$ і $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, \tilde{h}_{\text{F|N|U}})$ співпадають, тоді в них зникає вільна поведінка ізінгівських спінів. Співпасти ці точки можуть тільки в точці $(0, 0)$. Це реалізується на діаграмах третього типу при умові, що $\tilde{t}=\sqrt{1+\tilde{U}}/2$. У цьому випадку в точці $(0, 0)$ співіснує аж п'ять станів: FRI, FRI_{in} , UPA, UPA_{in} , який інверсний по z -компонентах ізінгівських спінів до стану UPA, і NAF . Характеристики ізінгівської підсистеми наступні:

$$R = 0, \quad \beta R = 2 \ln 2, \quad \beta h_0 = 0, \quad m_i = 0, \quad q_{ii}(n) = \frac{1}{4} \frac{1}{3^n}.$$

В електронної підсистеми намагніченість також відсутня: $m_e=0$. У цьому основному стані системи між ізінгівськими спінами наявна феромагнітна кореляція. Відсутність вільної поведінки ізінгівських спінів при $R=h_0=0$ зумовлена лінійною складовою в температурній залежності параметра R . Макроскопічне виродження цього основного стану більше за макроскопічне виродження основних станів у точках $\Delta\tilde{I}_{\text{F,N}}$ і $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, \tilde{h}_{\text{F|N|U}})$, про що свідчить залишкова ентропія: $s_{\text{res}}=k_B \ln 3$.

Якщо $\tilde{t}>\sqrt{1+\tilde{U}}/2$, то на фазових діаграмах третього типу в точці $(0, 0)$ співіснують три стани: UPA, UPA_{in} і NAF . Властивості ізінгівської підсистеми описуються співвідношеннями (2.2). В цьому випад-

ку основний стан системи в точці $(0, 0)$ фрустрований:

$$|\text{FRU}\rangle = \prod_{k=1}^N |\pm\rangle_k [\Psi_{\text{UPA}}]_{k,1;k,2}.$$

У стані $|\text{FRU}\rangle$ пара міжвузлових електронів перебуває у сплутаному стані Ψ_{UPA} , що типово для фрустрованих станів, які були виявлені у системах Ізінга-Гайзенберга [12–14]. Залишкова ентропія в цьому стані рівна $k_B \ln 2$.

Тепер розглянемо вплив кулонівського відштовхування \tilde{U} на вигляд фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Відштовхування \tilde{U} і перескоки \tilde{t} впливають на дві основні енергії $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}}$ і $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}}$. Саме через зміну цих двох енергій вони впливають на фазову діаграму $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Якщо зміну параметра \tilde{U} супроводжувати певною зміною параметра \tilde{t} так, щоб виконувалась умова незмінності енергії $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}}$, то перебудова фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ буде суттєво простішою. Зокрема, не зміниться положення $\Delta\tilde{I}_{\text{FU}}$ лінії співіснування основних станів FRI і UPA. У такому режимі незмінну енергію $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}}$ зручно прив'язати до точки $(\tilde{t}=\tilde{t}^*, \tilde{U}=0)$, де \tilde{t}^* — інтеграл перескоку в теорії без відштовхування. В результаті цього умова зміни параметра \tilde{U} має такий вигляд:

$$\sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} - \tilde{U} = 4\tilde{t}^* \quad (2.3)$$

Проаналізуємо вплив відштовхування в режимі (2.3) на вигляд фазової діаграми основного стану. Такий вплив показано на рис. 3, де у кожному з трьох випадків (а, b і c) набори параметрів \tilde{U} і \tilde{t} задовольняють умову (2.3) з певним \tilde{t}^* . Під впливом \tilde{U} в режимі (2.3) не змінюється заданий \tilde{t}^* типовий вигляд фазової діаграми, а лише дещо зміщуються лінії співіснування стану NAF зі станами FRI і UPA. В цьому сенсі всі діаграми для тих \tilde{U} і \tilde{t} , які через співвідношення (2.3) відповідають певному \tilde{t}^* , еквівалентні між собою. Використовуючи це будуюмо діаграму (\tilde{t}, \tilde{U}) , яка відображає вплив відштовхування і перескоків на фазову діаграму $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Ця діаграма представлена на рис. 4. Вона покрита “еквідіаграмними” лініями (2.3). На цій діаграмі легко бачити, що збільшення \tilde{U} при фіксованому \tilde{t} змінює фазову діаграму аналогічно як зменшення \tilde{t} при фіксованому \tilde{U} . Це означає, що вплив відштовхування на основний стан полягає у ефективному послабленні інтенсивності перескоків.

Переходимо до вивчення впливу відштовхування на польову і температурну залежності термодинамічних характеристик. Для цього розглянемо зміни термодинамічних характеристик відносно отриманих в роботі [19] результатів внаслідок зміни відштовхування в

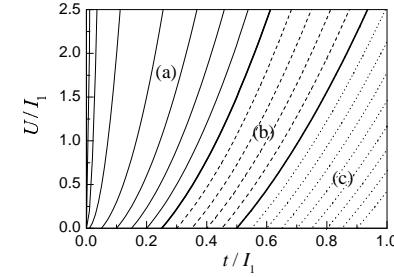


Рис. 4. Діаграма (\tilde{t}, \tilde{U}) , яка відображає вплив відштовхування і перескоків на вигляд фазової діаграми основного стану $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. (a), (b), (c) позначають області існування відповідних типів фазової діаграми $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$, які зображені на рис. 3. Границя між областями зображена товстими “еквідіаграмними” лініями. Области вкрито “еквідіаграмними” лініями: (a) тонкими суцільними, (b) штриховими і (c) пунктирними. Лінія $\tilde{t} = 0$ належить області (a).

режимі (2.3). У процесах намагнічення вплив відштовхування залежить від того, який основний стан FRI чи NAF реалізується при нулі магнітного поля. У випадку реалізації основного стану FRI вплив відштовхування практично відсутній (рис. 5,a), а у випадку реалізації основного стану NAF він, навпаки, суттєвий (рис. 6,a). Це пов'язано з тим, що зростання відштовхування збільшує значення критичного поля, при якому плато нульової намагніченості змінюється платом намагніченості $(1/3)m_s$ (рис. 6,a). В результаті цього крива намагнічення при температурі 0.05 на відміну від випадку $\tilde{U}=0$ [19] демонструє розмиття плато нульової намагніченості (рис. 6,a). Збільшення польового проміжку нульової намагніченості відображається також на поведінці низькотемпературних кривих намагніченості при відповідних магнітних полях (рис. 6,b).

Незалежно яким є основний стан при нулі магнітного поля, збільшення відштовхування зміщує високотемпературну сумарну намагніченість m вверх (рис. 5,b і рис. 6,b). Щоб зрозуміти механізм цього зміщення, розглянемо температурну залежність намагніченостей ізінгівської і електронної підсистем (рис. 7). Виявляється, що внаслідок збільшення відштовхування високотемпературні криві намагніченості цих підсистем зазнають протилежних зміщень: високотемпературна крива намагніченості ізінгівської підсистеми зміщується вниз (рис. 7,a), а високотемпературна крива намагніченості електронної підсистеми зміщується вверх (рис. 7,b). Оскільки еле-

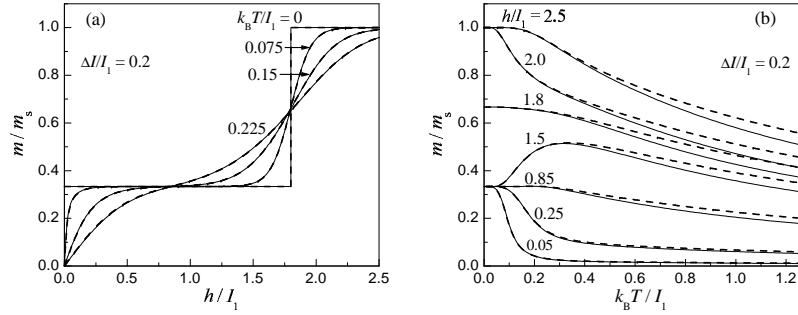


Рис. 5. Сумарна намагніченість в залежності від магнітного поля при різних температурах (а) і від температури при різних магнітних полях (б) для випадку, коли стан FRI основний при нулі магнітного поля. Суцільними лініями зображено результати при $\tilde{U} = 0$ і $\tilde{t} = 0.375$, які співпадають з відповідними результатами роботи [19]. Штриховими лініями зображено результати при $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{t} = 1.0$.

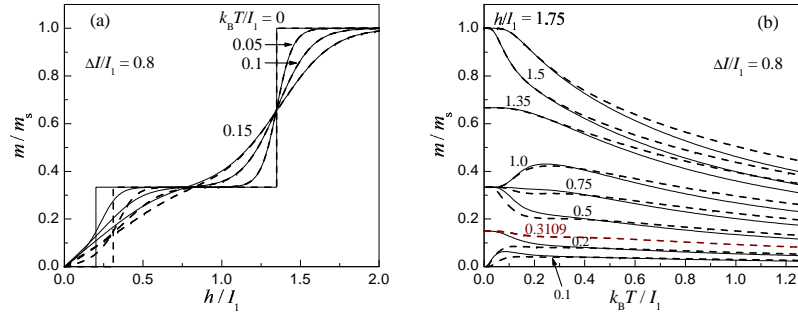


Рис. 6. Сумарна намагніченість в залежності від магнітного поля при різних температурах (а) і від температури при різних магнітних полях (б) для випадку, коли стан NAF основний при нулі магнітного поля. Суцільними лініями зображено результати при $\tilde{U} = 0$ і $\tilde{t} = 0.375$, які співпадають з відповідними результатами роботи [19]. Штриховими лініями зображено результати при $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{t} = 1.0$.

ектронна підсистема удвічі більша за ізінгівську, вона визначає напрям зміщення високотемпературної сумарної намагніченості. Збільшення високотемпературної намагніченості електронної підсистеми внаслідок збільшення відштовхування може бути пояснено відповідним збільшенням принаймні двох високих енергій в спектрі гамільтоніана \mathcal{H}_k (1.4), а саме \mathcal{E}_5 і \mathcal{E}_6 , відносно інших енергій. Внаслідок

цього зменшується термодинамічна ймовірність станів з цими енергіями, а саме в цих станах відсутня намагніченість пари електронів. При близьких до нуля температурах це не проявляється тому, що тоді стани з високими енергіями \mathcal{E}_5 і \mathcal{E}_6 відіграють в термодинаміці дуже малу роль вже при $\tilde{U}=0$. Як показав числовий аналіз, зменшенню високотемпературної намагніченості ізінгівських спінів внаслідок збільшення відштовхування відповідає зменшення ефективного магнітного поля h_0 .

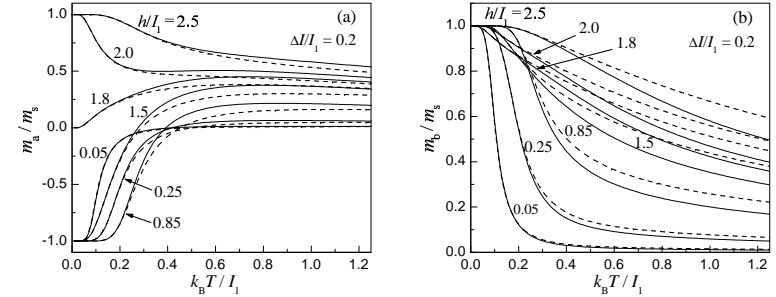


Рис. 7. Намагніченості ізінгівської (а) і електронної (б) підсистем в залежності від температури при різних магнітних полях. Ці намагніченості формують сумарну намагніченість системи на рис. 5. Суцільними лініями зображено результати при $\tilde{U} = 0$ і $\tilde{t} = 0.375$. Штриховими лініями зображено результати при $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{t} = 1.0$.

Коли асиметрія ізінгівських взаємодій $\tilde{\Delta I}$ попадає в певний окіл критичної точки $\tilde{\Delta I}_{F,N}$, або в область основного стану NAF, то низькотемпературні криві магнітної сприйнятливості помноженої на температуру $\chi k_B T$ при нулі магнітного поля зазнають суттєвих змін під впливом відштовхування (рис. 8,a). Ці зміни можуть бути пов'язані зі зменшенням енергії основного стану NAF від збільшення відштовхування, аналогічно як зміни кривих намагнічення. Високотемпературні криві $\chi k_B T$ зі збільшенням відштовхування зміщуються в область вищих значень $\chi k_B T$ (рис. 8,b). Мабуть, тут проявляється перебудова високоенергетичної частини спектру гамільтоніана \mathcal{H}_k (1.4), внаслідок якої зменшується термодинамічна ймовірність станів з нульовою намагніченістю міжвузлової пари електронів. Тому для певної високої температури система при $\tilde{U}=55/12$ має більшу намагніченість і магнітну сприйнятливості ніж при $\tilde{U}=0$. В обох випадках, $\tilde{U}=55/12$ і $\tilde{U}=0$, температурні криві $\chi k_B T$ для критичної асиметрії ізінгівських взаємодій $\tilde{\Delta I}_{F,N}$ в границі $T \rightarrow 0$ прямують до значення $1/12$.

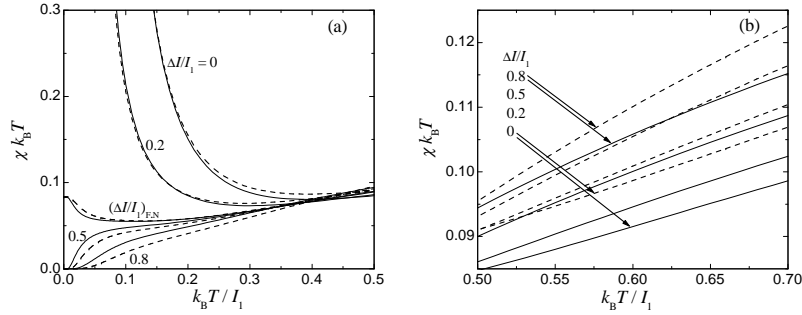


Рис. 8. Помножена на температуру магнітна сприйнятливість $\chi k_B T$ в залежності від температури при нулі магнітного поля. Суцільними лініями зображено результати при $\tilde{U} = 0$ і $\tilde{t} = 0.375$, які співпадають з відповідними результатами роботи [19]. Штриховими лініями зображено результати при $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{t} = 1.0$.

Розглянемо вплив відштовхування на температурну залежність теплоємності при нулі магнітного поля. У цій залежності при $\tilde{U}=0$ спостерігали два максимуми [19]: головний і ближчий до нуля температури другорядний (рис. 9). На відміну від цього при $\tilde{U}=55/12$ високотемпературна залежність теплоємності на рис. 9 має головний максимум відчутно меншої висоти і додатково дуже широкий, низький максимум при значно вищій температурі за температуру головного максимуму. Цей додатковий максимум виникає тільки при сильному відштовхуванні. При $\tilde{U}=7/12$ він не виникає, а лише перебудовується головний максимум: понижується, розширюється і дещо зміщується до вищих температур. Все це вказує на те, що головний максимум пов'язаний не лише з тими тепловими збудженнями, які руйнують викликані більшою ізінгівською взаємодією I_1 димеро-подібні антиферромагнітні кореляції між ізінгівськими і електронними спінами [19], але й з тими тепловими збудженнями, які руйнують антиферромагнітні кореляції між спінами міжвузлової пари електронів, і які долають однопозиційне кулонівське відштовхування електронів. При зміні відштовхування з 0 на $55/12$ низькотемпературна частина теплоємності, яка включає другорядний максимум, у випадку попадання $\Delta\tilde{I}$ в область основного стану FRI практично не змінюється (рис. 9,a), а при попаданні $\Delta\tilde{I}$ в область основного стану NAF зазнає суттєвої зміни (рис. 9,b). Зрозуміло, що ця зміна може бути пов'язана зі зміною енергії основного стану NAF.

Виявляється, що низькотемпературна теплоємність при нулі ма-

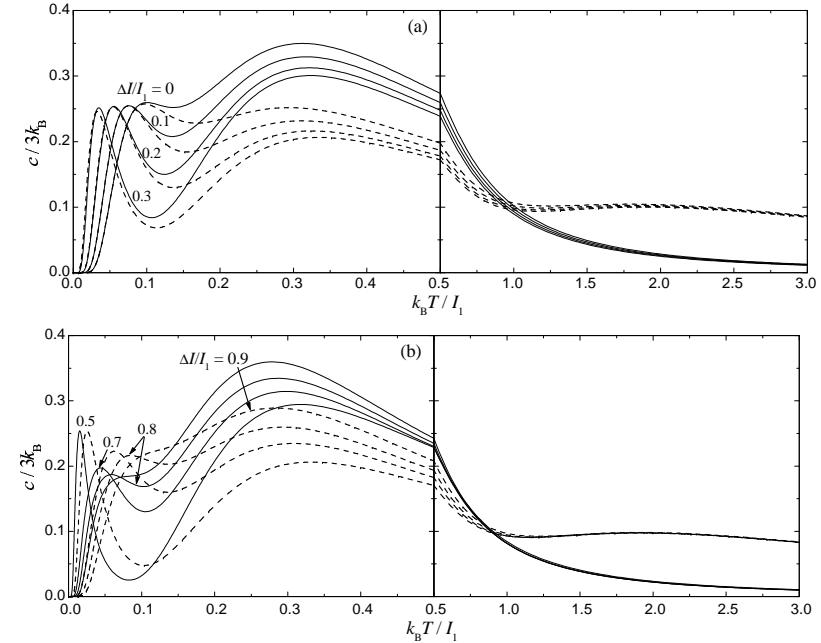


Рис. 9. Теплоємність при нулі магнітного поля в залежності від температури для двох випадків: стан FRI є основним (a) і стан NAF є основним (b). Суцільними лініями зображено результати при $\tilde{U}=0$ і $\tilde{t}=0.375$, які співпадають з відповідними результатами роботи [19]. Штриховими лініями зображено результати при $\tilde{U}=55/12$ і $\tilde{t} = 1.0$.

гнітного поля крім структури з одним другорядним максимумом (рис. 9), який пов'язувався з тепловими переходами між двома станами FRI і NAF [19], може мати структуру з двома другорядними максимумами (рис. 10). Утворення найближчого до нуля температури додаткового максимуму в теплоємності не пов'язано з врахуванням відштовхування, бо це має місце також при $\tilde{U} = 0$. Цей максимум виникає тоді, коли параметр $\Delta\tilde{I}$ попадає в певний малий окіл критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F.N}$. Якщо проходити цей окіл з основного стану FRI, то з другорядного максимуму теплоємності утворюється два максимуми. При наближенні до критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F.N}$ розміщений при найнижчій температурі максимум швидко наближається до нуля температури і в критичній точці зникає (рис. 10,a). За критичною точкою в стані NAF біля нуля температури знову появляється максимум. При віддаленні від критичної точки він швидко наближає-

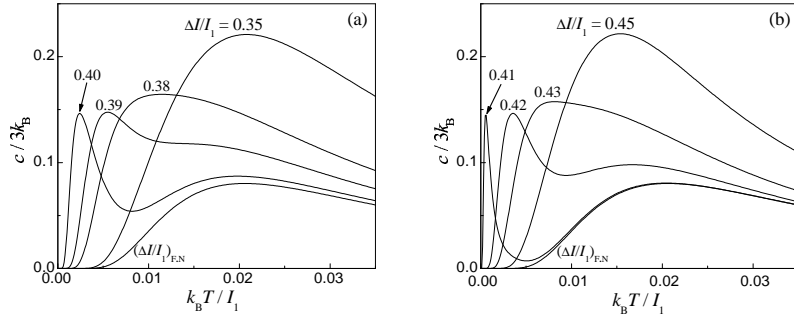


Рис. 10. Теплоємність при нулі магнітного поля в залежності від температури для параметрів $\tilde{t} = 1.0$ і $\tilde{U} = 55/12$. Розглядається зміна $\Delta\tilde{I}$ в малому околі критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N} = 0.40815$: зміна $\Delta\tilde{I}$ з основного стану FRI до критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ (a), зміна $\Delta\tilde{I}$ з критичної точки $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ в глибокій області основного стану NAF (b). Показано розділення низькотемпературного максимуму на два максимуми.

ться до іншого низькотемпературного максимуму і вони зливаються (рис. 10,b). З цього слідує, що зникаючий у критичній точці $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ максимум пов'язаний з тепловими збудженнями, які відповідають за переходи між двома станами FRI і NAF. А не зникаючий у критичній точці $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ низькотемпературний максимум пов'язаний з тепловими збудженнями, які відповідають за переходи щонайменше між трьома станами FRI, NAF і UPA. Крім даної моделі теплоємність може мати два низькотемпературні максимуми також в спин-1/2 ромбічному ланцюжку Ізінга-Гайзенберга [12] і спин-1/2 дисторсному ромбічному ланцюжку Ізінга [9]. Але в теплоємності ромбічного ланцюжка Ізінга-Гайзенберга другий низькотемпературний максимум може утворитися тільки за наявності дуже малого магнітного поля [12].

3. Підсумки і висновки

Для спин-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга-Габбарда з врахуванням однопозиційного кулонівського відштовхування методом декораційно-ітераційного перетворення точно розраховано термодинамічні характеристики: вільну енергію, ентропію, теплоємність, намагніченість ізінгівської і габбардівської підсистем, магнітну сприйнятливості. У випадку антиферромагнітної взаємодії Ізінга, коли система геометрично фрустрована, досліджено вплив кулонівського відштовхування на основний стан і в режимі (2.3) на термоди-

наміку: намагніченість в залежності від поля і температури, магнітну сприйнятливості і теплоємність в залежності від температури.

У системі з кулонівським відштовхуванням реалізуються такі самі чотири основні стани (SPA, FRI, UPA, NAF) і такі самі три типові фазові діаграми основного стану ($\Delta\tilde{I}, \tilde{h}$) як у системі без кулонівського відштовхування [19]. Вплив кулонівського відштовхування на фазову діаграму основного стану зручно досліджувати в режимі (2.3), в якому зміна відштовхування супроводжується певною зміною інтенсивності перескоків і залишається незмінною енергія стану UPA. У цьому режимі вплив відштовхування не змінює типу фазової діаграми основного стану, а лише зміщує граничні лінії області основного стану NAF. Вплив відштовхування і перескоків на вигляд фазової діаграми ($\Delta\tilde{I}, \tilde{h}$) показано діаграмою (\tilde{t}, \tilde{U}) . Таким чином отримано повний діаграмний опис основного стану в залежності від параметрів моделі. Показано, що зростання кулонівського відштовхування послаблює антиферромагнітні кореляції між спінами електронів.

Виявлено ряд цікавих властивостей основного стану на лініях і в точках фазових діаграм ($\Delta\tilde{I}, \tilde{h}$). На лінії співіснування основних станів FRI і SPA і при $\tilde{t} > \sqrt{1 + \tilde{U}}/2$ в точці (0,0) основний стан фрустрований. А у точці $(\Delta\tilde{I}_{F|U}, 2 - \Delta\tilde{I}_{F|U})$, де закінчується лінія співіснування станів FRI і SPA, основний стан вже не фрустрований через наявність лінійної складової в температурних залежностях параметрів R і h_0 , яка визначає поведінку ізінгівської підсистеми в нулі температури при $R = h_0 = 0$. Але макроскопічне виродження цього основного стану перевищує виродження фрустрованого стану: воно дає $s_{\text{res}} = k_B \ln[(3 + \sqrt{5})/2]$. У точках $\Delta\tilde{I}_{F,N}$ і $(\Delta\tilde{I}_{F|U}, \tilde{h}_{F|N|U})$ ізінгівські спіни поведуться вільно, а стан міжвузлової пари електронів однозначно визначається станами сусідніх ізінгівських спінів. Якщо ці точки співпадають в точці (0,0), то ізінгівські спіни втрачають вільну поведінку. Незважаючи на це такий основний стан має найбільше макроскопічне виродження: $s_{\text{res}} = k_B \ln 3$.

Вплив кулонівського відштовхування на процеси намагнічення, низькотемпературні криві намагніченості та магнітної сприйнятливості відчувається поблизу границі основного стану NAF і є наслідком її зміщення. Зростання кулонівського відштовхування зміщує високотемпературні криві намагніченості підсистем: електронної підсистеми до збільшення намагніченості, а ізінгівської підсистеми до зменшення намагніченості. В результаті цього високотемпературна крива сумарної намагніченості зміщується у область вищих намагніченостей. При цьому високотемпературна магнітна сприйнятливості зміщується аналогічно. Зростання кулонівського відштов-

хування зменшує висоту головного максимуму теплоємності, а при асиметрії ізінгівських взаємодій з області основного стану NAF перебудовує ще й другорядний максимум теплоємності. Сильне відштовхування зумовлює появу додаткового максимуму теплоємності розташованого значно вище за температуру головного максимуму.

Загалом вплив кулонівського відштовхування у режимі (2.3) на фазову діаграму основного стану і термодинамічні характеристики може бути пояснений перебудовою енергетичного спектру міжвузлової пари електронів: при збільшенні відштовхування зростають певні енергії з високоенергетичної частини спектру і спадає енергія стану NAF з низькоенергетичної частини спектру.

Теплоємність при нулі магнітного поля може мати два низькотемпературні максимуми, що не пов'язано з врахуванням кулонівського відштовхування. Це має місце при попаданні асиметрії ізінгівських взаємодій в певний окіл критичної точки $\Delta\tilde{J}_{F,N}$. В самій критичній точці найближчий до нуля температури максимум зникає. Це означає, що він відповідає тепловим збудженням з енергією $|\tilde{\mathcal{E}}_{FRI} - \tilde{\mathcal{E}}_{NAF}|$.

Автор вдячний д.ф.-м.н. О.В. Держку і к.ф.-м.н. Т.М. Верхоляку за обговорення результатів, корисні поради і зауваження.

Література

1. E. Lieb, T. Schultz, and D. Mattis, *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961).
2. H. Yao, J. Li, and Ch. Gong, *Solid State Commun.* **121**, 687 (2002).
3. O. Derzhko, J. Richter, T. Krokhmalskii, and O. Zaburannyi, *Phys. Rev. E* **69**, 066112 (2004).
4. I. Syozi, *Prog. Theor. Phys.* **6**, 341 (1951).
5. M. Fisher, *Phys. Rev.* **113**, 969 (1959).
6. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва, (1985).
7. T. Kaneyoshi, *Prog. Theor. Phys.* **97**, 407 (1997).
8. V.R. Ohanyan, N.S. Ananikian, *Phys. Lett. A* **307**, 76 (2003).
9. J.S. Valverde, Onofre Rojas, S.M. de Souza, *Physica A* **387**, 1947 (2008).
10. J. Strečka and M. Jaščur, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 4519 (2003).
11. J. Strečka, M. Jaščur, M. Hagiwara, K. Minami, Y. Narumi, and K. Kindo, *Phys. Rev. B* **72**, 024459 (2005).
12. L. Čanová, J. Strečka, M. Jaščur, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 4967 (2006).

13. L. Čanová, J. Strečka, T. Lučivjanský, *Condens. Matter Phys.* **12**, 353 (2009).
14. V. Ohanyan, *Condens. Matter Phys.* **12**, 343 (2009).
15. J. S. Valverde, Onofre Rojas, and S. M. de Souza, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 345208 (2008).
16. D. Antonosyan, S. Bellucci, and V. Ohanyan, *Phys. Rev. B* **79**, 014432 (2009).
17. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, *Phys. Rev. Lett.* **94**, 227201 (2005).
18. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159**, 1 (2005).
19. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, and M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* **77**, 024402 (2008).
20. O. Derzhko, A. Honecker, and J. Richter, *Phys. Rev. B* **79**, 054403 (2009).
21. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra, *Phys. Rev. B* **79**, 054427 (2009).
22. B. Lisnii, *Ukr. J. Phys.* **53**, 708 (2008).

CONDENSED MATTER PHYSICS

The journal **Condensed Matter Physics** is founded in 1993 and published by Institute for Condensed Matter Physics of the National Academy of Sciences of Ukraine.

AIMS AND SCOPE: The journal **Condensed Matter Physics** contains research and review articles in the field of statistical mechanics and condensed matter theory. The main attention is paid to physics of solid, liquid and amorphous systems, phase equilibria and phase transitions, thermal, structural, electric, magnetic and optical properties of condensed matter. Condensed Matter Physics is published quarterly.

ABSTRACTED/INDEXED IN:

- Chemical Abstract Service, Current Contents/Physical, Chemical&Earth Sciences
- ISI Science Citation Index-Expanded, ISI Alerting Services
- INSPEC
- Elsevier Bibliographic Databases (EMBASE, EMNursing, Compendex, GEOBASE, Scopus)
- "Referativnyi Zhurnal"
- "Dzherelo"

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk, *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Freiburg*; R. Folk, *Linz*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch, *Lviv*; M. Holovko, *Lviv*; O. Ivankiv, *Lviv*; W. Janke, *Leipzig*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; H. Krienke, *Regensburg*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod, *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; N. Plakida, *Dubna*; G. Röpke, *Rostock*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; M. Vavruk, *Lviv*; A. Zagorodny, *Kyiv*

CONTACT INFORMATION:

Institute for Condensed Matter Physics
of the National Academy of Sciences of Ukraine
1 Svientsitskii Str., 79011 Lviv, Ukraine
Tel: +38(032)2760908; Fax: +38(032)2761978
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>