

ІНСТИТУТ
ФІЗИКИ
КОНДЕНСОВАНИХ
СИСТЕМ

ICMP-17-07U

О.Р. Баран, В.Р. Оганян*, Т.М. Верхоляк

ВЛАСТИВОСТІ ОСНОВНОГО СТАНУ СПІН-1/2 XY МОДЕЛІ
МАГНЕТОЕЛЕКТРИКА НА ЗИГЗАГ ЛАНЦЮЖКУ.
ТОЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ

*Лабораторія теоретичної фізики, фізичний факультет, Єреванський державний університет, вул. Алека Манукяна, 1, 0025 Єреван, Вірменія

УДК: 548:573.611.4

PACS: 75.10.Jm

Властивості основного стану спин-1/2 XY моделі магнетоелектрика на зигзаг ланцюжку. Точні результати

О.Р. Баран, В.Р. Оганян, Т.М. Верхоляк

Анотація. Розглянута спин-1/2 XY модель магнетоелектрика з механізмом Кацури-Нагаоши-Балацького пов'язаності локалізованих спінів із електричною поляризованістю зв'язку, що з'єднує ці спіни, на зигзаг ланцюжку. Використовуючи перетворення Йордана-Вігнера задача зводиться до гамільтоніану невзаємодіючих безспінових ферміонів і може бути розв'язаною точно. Побудовано ряд фазових діаграм основного стану та розраховано при нульовій температурі залежності намагніченості та електричної поляризації від параметрів моделі.

The ground state properties of spin-1/2 XY model of the magnetoelectric on zigzag ladder. Exact results

O.R. Baran, V.R. Ohanyan, T.M. Verkholyak

Abstract. The spin-1/2 XY model of magnetoelectric with the Katsura-Nagaosa-Balatsky mechanism of the coupling between local spins and the electric polarization of the bond connecting these spins on zigzag ladder is considered. Using the Jordan-Wigner transformation, the Hamiltonian is reduced to a free-fermion form, and can be solved exactly. The ground-state phase diagrams are constructed and the magnetic and electric fields dependence of magnetization and electric polarization at zero temperature is calculated.

**Подається в Журнал фізичних досліджень
Submitted to Journal of Physical Studies**

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/>)

Остап Романович Баран
Вадим Робертович Оганян
Тарас Михайлович Верхоляк

ВЛАСТИВОСТІ ОСНОВНОГО СТАНУ СПІН-1/2 ХУ МОДЕЛІ
МАГНЕТОЕЛЕКТРИКА НА ЗИГ'ЗАГ ЛАНЦЮЖКУ. ТОЧНІ РЕЗУЛЬТАТИ

Роботу отримано 18 листопада 2017 р.

Затверджено до друку Вченою радою ІФКС НАН України

Рекомендовано до друку відділом квантової статистики

Виготовлено при ІФКС НАН України

© Усі права застережені

1. Вступ

Магнетoeлектричні сполуки та відповідні їм квантові спінові або електронні моделі залишаються об'єктами широких досліджень протягом останніх десяти років [1–5]. Хоча магнетoeлектричний ефект було обґрунтовано теоретично [6] та виявлено експериментально [7] у сполуці Cr_2O_3 вже півстоліття тому, мікроскопічне пояснення цього явища тривалий час було невідомим. На даний час запропоновано декілька механізмів виникнення магнетoeлектричного ефекту в кристалах: модель магнетострикції, модель залежної від спіна $p-d$ гібридизації орбіталей та модель магнітного потоку або інверсної взаємодії Дзялошинського-Морія (див. огляд [1]). Останній з них було розвинуто в роботах [8, 9] та часто коротко позначається як механізм Кацури-Нагаоши-Балацького (КНБ). Він ґрунтується на твердженні, що поляризація на зв'язку між двома магнітними атомами пропорційна до спінового струму між ними. З іншого боку в моделі Гайзенберга операторна форма спінового струму має вигляд взаємодії Дзялошинського-Морія. Даний механізм спостерігається в ряді магнітних сполук, зокрема в одновимірному магнетoeлектрику CuCl_2 [10]. Окрім того кристали LiCu_2O_2 [11] та LiCuVO_4 [12] також можуть бути достатньо добре описаними в рамках одновимірної КНБ моделі.

Попри фундаментальне значення магнетoeлектричного ефекту, він також відкриває широкі можливості для технологічних застосувань завдяки механізму керування магнітними властивостями матеріалів за допомогою електричного поля і навпаки [13, 14]. Тут можна згадати проектування на основі магнетoeлектриків носіїв інформації, які обходяться без електричних струмів [15], оптичних діодів на BiFeO_3 [16] та інше. Останній приклад став можливим завдяки динамічному магнетoeлектричному ефекту, який знаходить своє застосування в багатьох областях [17–19]. Так, під дією лазера у магнетoeлектриках створюється спіновий струм, оскільки згідно теорії Флоке сильні періодичні поля генерують у гамільтоніані додаткові взаємодії, які дозволяють динамічно контролювати магнетoeлектричний зв'язок [17]. Такий спіновий струм можна виявити за допомогою оптоспінтронних пристроїв. Іншим цікавим явищем є динамічні фазові переходи спричинені ультракороткими періодичними пульсуваннями електричного поля [19].

Нажаль, для магнетoeлектричних систем є небагато строгих результатів, і наскільки нам відомо, всі вони стосуються одновимірних моделей [20–22]. Квантовий спін-1/2 XXZ ланцюжок із КНБ меха-

нізмом пов'язаності намагніченості з електричною поляризованістю було розв'язано в роботі [20], де, зокрема, досліджено намагніченість, електрична поляризація, магнетоелектричний тензор як функції електричних та магнітних полів. Було виявлено, що така проста модель не передбачає нетривіальний лінійний магнетоелектричний ефект, коли намагніченість (електрична поляризація) індукується лишень електричним (магнітним) полем. Це явище вдається описати, якщо додати до системи додаткові взаємодії. Так, у XU ланцюжку з триспіновими взаємодіями реалізується згаданий нетривіальний магнетоелектричний ефект [21]. Нещодавно одновимірну модель квантового компасу було узагальнено на випадок магнетоелектрика з КНБ механізмом та розв'язано точно [22].

Квазіодновимірні магнетоелектрики часто не володіють ідеальною ланцюжковою структурою, натомість магнітні атоми розташовуються на деформованому зигзаг ланцюжку, як у сполуді LiCu_2O_2 [23]. Тому цікавим є узагальнити відомі моделі магнетоелектриків на прямому ланцюжку на випадок згаданого деформованого ланцюжка.

В своїй роботі ми розглядаємо точно розв'язувану спін-1/2 XU модель магнетоелектрика з механізмом інверсної взаємодії Дзялошинського-Морія, в якій спіни розміщені в одній площині на зламах зигзаг ланцюжка. Вивчаємо, як така деформація впливає на магнітну та діелектричну поведінку системи.

2. Спін-1/2 XU модель магнетоелектрика на зигзаг ланцюжку

Будемо розглядати спін-1/2 XU модель магнетоелектрика з геометрією зигзаг ланцюжка (див. Рис. 1), в якій пов'язаність локалізованих спінів (тобто магнітних моментів) із електричною поляризованістю зв'язку, що з'єднує ці спіни, описується механізмом Кацури-Нагаоши-Балацького [8]. Гамільтоніан моделі має вигляд [21]:

$$H = J \sum_{i=1}^N \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y \right) - h \sum_{i=1}^N S_i^z - J \sum_{i=1}^N \mathbf{E} \cdot \mathbf{p}_{i,i+1}. \quad (2.1)$$

Тут h — зовнішнє магнітне поле; J — обмінна взаємодія між найближчими сусідами; $\mathbf{E}$ — зовнішнє електричне поле, перпендикулярне до осі z ; $\mathbf{p}_{i,i+1} \propto [\mathbf{l}_{i,i+1} \times [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_{i+1}]]$ — електрична поляризація зв'язку, що з'єднує $\mathbf{S}_i$ та $\mathbf{S}_{i+1}$, де $\mathbf{l}_{i,i+1}$ є одиничним вектором орієнтованим від i -го до $(i+1)$ -го вузла. Слід зауважити, що осі x, y, z простору

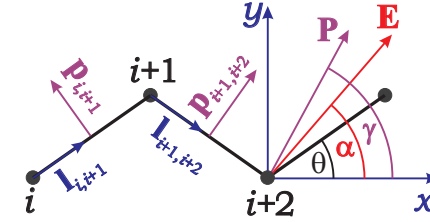


Рис. 1. Зигзаг ланцюжок, де приведені осі координат, вектори електричного поля $\mathbf{E} = (E_x, E_y, 0)$ та електричної поляризації ланцюжка $\mathbf{P} = (P_x, P_y, 0)$, а також одиничні вектори $(\mathbf{l}_{i,i+1}, \mathbf{l}_{i+1,i+2})$ та вектори поляризації $(\mathbf{p}_{i,i+1}, \mathbf{p}_{i+1,i+2})$ двох сусідніх зв'язків. Вектори $\mathbf{P}$, $\mathbf{E}$ та $\mathbf{l}_{i,i+1}$ знаходяться до осі x під кутами γ , α та θ відповідно. Для більшої наочності ми зобразили вектори поляризації зв'язків перпендикулярними до осі z , оскільки при $E_z = 0$ можемо вважати їхні z компоненти рівними нулевим (через відсутність у гамільтоніані).

та спінового простору співпадають, а ланцюжок лежить в площині (x, y) вздовж осі x .

Гамільтоніан (2.1) можна представити у вигляді

$$H = \sum_{i=1}^N \left[J \left(S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y \right) - h S_i^z + J \left((-1)^i E_x \sin \theta + E_y \cos \theta \right) \left(S_i^x S_{i+1}^y - S_i^y S_{i+1}^x \right) \right], \quad (2.2)$$

де явно виділено доданок типу Дзялошинського-Морія. Те, що знаки біля компоненти поля E_x є різними для парних і непарних вузлів — наслідок того, що x компоненти електричної поляризації сусідніх зв'язків мають різні знаки (див. Рис. 1).

3. Перетворення Йордана-Вігнера

З допомогою одновимірного перетворення Йордана-Вігнера [24, 25] для операторів $S_i^\pm = S_i^x \pm i S_i^y$

$$S_j^+ = \exp \left(-i\pi \sum_{i=1}^{j-1} c_i^\dagger c_i \right) c_j^+, \quad S_j^- = \exp \left(i\pi \sum_{i=1}^{j-1} c_i^\dagger c_i \right) c_j^- \quad (3.1)$$

здійснюється перехід до оператори c_i^+ та c_i , які задовільняють переставні співвідношення Фермі

$$\{c_i, c_j^+\} = \delta_{i,j}, \quad \{c_i^+, c_j^+\} = \{c_i, c_j\} = 0. \quad (3.2)$$

У результаті ферміонізації (3.1) приходимо до задачі невзаємодіючих безспінових ферміонів:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{i=1}^N \left[\frac{J}{2} (c_i^+ c_{i+1}^- + c_{i+1}^+ c_i^-) - h (c_i^+ c_i^- - \frac{1}{2}) \right. \\ & \left. + i \frac{J}{2} (E_x (-1)^i \sin \theta + E_y \cos \theta) (c_i^+ c_{i+1}^- - c_{i+1}^+ c_i^-) \right]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

Після переходу до імпульсного простору

$$\begin{aligned} c_i &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{iqi} c_q; & c_i^+ &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q e^{-iqi} c_q^+; \\ q &= \frac{2\pi}{N} k; & k &= -\frac{N}{2} + 1, -\frac{N}{2} + 2, \dots, \frac{N}{2} \end{aligned} \quad (3.4)$$

отримаємо:

$$\begin{aligned} H = & \sum_{-\pi < q \leq \pi} \left[(J \cos q - J E_y \cos \theta \sin q - h) c_q^+ c_q \right. \\ & \left. - i J E_x \sin \theta \cos q c_q^+ c_{q \pm \pi} \right] + \frac{N h}{2}. \end{aligned} \quad (3.5)$$

Квадратичну форму (3.5) можна представити у матричному вигляді:

$$H = \sum_{-\frac{\pi}{2} < q \leq \frac{\pi}{2}} \left[(c_q^+ \ c_{q \pm \pi}^+) \begin{pmatrix} A_{11} - h & i A_{12} \\ -i A_{12} & -A_{11} - h \end{pmatrix} \begin{pmatrix} c_q \\ c_{q \pm \pi} \end{pmatrix} \right] + \frac{N h}{2}, \quad (3.6)$$

де тепер q належить половині першої зони Бріллюена та введені позначення

$$A_{11} = J \cos q - J E_y \cos \theta \sin q, \quad A_{12} = -J E_x \sin \theta \cos q. \quad (3.7)$$

Оскільки в даній роботі нас цікавлять лише термодинамічні властивості досліджуваної моделі, знайдемо тільки власні значення матриці 2×2 із співвідношення (3.6):

$$\lambda_{\pm} = \pm \sqrt{A_{11}^2 + A_{12}^2} - h \quad (3.8)$$

(для розрахунку динамічних властивостей необхідними були би ще і відповідні власні функції). Легко бачити, що тепер ми можемо записати (3.6) у діагональному вигляді

$$H = \sum_{-\frac{\pi}{2} < q \leq \frac{\pi}{2}} (a_q^+ \ a_{q \pm \pi}^+) \begin{pmatrix} \lambda_- & 0 \\ 0 & \lambda_+ \end{pmatrix} \begin{pmatrix} a_q \\ a_{q \pm \pi} \end{pmatrix} + \frac{N h}{2}, \quad (3.9)$$

де a_q^+ та a_q — нові оператори Фермі, та представити гамільтоніан моделі магнетоелектрика у такій остаточній формі:

$$H = \sum_{-\pi < q \leq \pi} \lambda_q a_q^+ a_q + \frac{N h}{2}. \quad (3.10)$$

Тут q належить першій зоні Бріллюена, а спектр визначається таким чином:

$$\lambda_q = -\text{sgn}(\cos q) \sqrt{A_{11}^2 + A_{12}^2} - h. \quad (3.11)$$

У термодинамічній границі на основі (3.10) отримаємо вільну енергію:

$$F = -k_B T \ln \text{Tr} e^{-\beta H} = -k_B T \frac{N}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} \ln \left[2 \cosh \frac{\beta \lambda_q}{2} \right] dq. \quad (3.12)$$

Тепер ми можемо розрахувати намагніченість m та електричну поляризацію $\mathbf{p} = \mathbf{P}/N = (p_x, p_y, 0)$ з розрахунку на одну частинку:

$$m = -\frac{1}{N} \frac{dF}{dh} = -\frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq \tanh \frac{\beta \lambda_q}{2} \quad (3.13)$$

$$p_x \propto -\frac{1}{N} \frac{dF}{dE_x} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq \tanh \frac{\beta \lambda_q}{2} \text{sgn}(\cos q) \frac{A_{12} J \sin \theta \cos q}{\sqrt{A_{11}^2 + A_{12}^2}} \quad (3.14)$$

$$p_y \propto -\frac{1}{N} \frac{dF}{dE_y} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dq \tanh \frac{\beta \lambda_q}{2} \text{sgn}(\cos q) \frac{A_{11} J \cos \theta \sin q}{\sqrt{A_{11}^2 + A_{12}^2}} \quad (3.15)$$

4. Дослідження властивостей основного стану

У даному розділі зупинимося на дослідженні властивостей основного стану. Будемо використовувати співвідношення

$$\tanh \frac{\beta \lambda_q}{2} \Big|_{T=0} = \text{sgn}(\lambda_q). \quad (4.1)$$

Зразу зауважимо, що для більшої наочності (або ж зручності) часом користуватимемося параметрами E_x та E_y , а часом параметрами $|\mathbf{E}|$ та α . Аналогічно і для електричної поляризації: або p_x та p_y , або ж $|\mathbf{p}|$ та γ .

З фізичних міркувань обмежимося інтервалом $\theta \in [0, \pi/3]$. Те, що $\theta < \pi/3$, зумовлено тим, щоб наступні після найближчих сусідів не стали ближчими між собою, аніж найближчі сусіди.

Для моделі (2.1) в основному стані мають місце такі п'ять властивостей:

$$1) \quad m(E_x, E_y) = m(|E_x|, |E_y|), \quad |p_x|(E_x, E_y) = |p_x|(|E_x|, |E_y|), \quad (4.2)$$

$$|p_y|(E_x, E_y) = |p_y|(|E_x|, |E_y|),$$

(тобто, m , $|p_x|$, $|p_y|$ не міняються при заміні $\alpha \rightarrow -\alpha, \pi \pm \alpha$, причому зрозуміло, що $\text{sgn}(m) = \text{sgn}(h)$, $\text{sgn}(p_x) = \text{sgn}(E_x)$, $\text{sgn}(p_y) = \text{sgn}(E_y)$);

$$2) \quad m(\theta, E_x, E_y) = m(\theta' = \pi/2 - \theta, E'_x = E_y, E'_y = E_x), \quad (4.3)$$

$$|p_x|(\theta, E_x, E_y) = |p_y|(\theta' = \pi/2 - \theta, E'_x = E_y, E'_y = E_x),$$

$$|p_y|(\theta, E_x, E_y) = |p_x|(\theta' = \pi/2 - \theta, E'_x = E_y, E'_y = E_x),$$

(тобто, при одночасній заміні $\theta \rightarrow \pi/2 - \theta$ та $\alpha \rightarrow \pi/2 - \alpha$ величини m та $|\mathbf{p}|$ не міняються, проте міняється кут $\gamma \rightarrow \pi/2 - \gamma$);

$$3) \quad \mathbf{p}(h) = \mathbf{p}(|h|); \quad (4.4)$$

$$4) \quad m(J) = m(|J|), \quad \mathbf{p}(J) = \mathbf{p}(|J|); \quad (4.5)$$

$$5) \quad m(\theta, \alpha) = m(\theta' = \alpha, \alpha' = \theta). \quad (4.6)$$

Таким чином, без втрати загальності ми можемо зменшити інтервал для кута θ до $\theta \in [0, \pi/4]$ та обмежитися лише додатніми значеннями величин h , J , E_x , E_y (тобто кутами $\alpha \in [0, \pi/2]$). Надалі покладемо $J = 1$.

Із вигляду спектру (3.11) видно (див. Рис. 2), що у основному стані можемо розрізнати три фази: із $m = 0$, із $m = 0.5$ та фазу безщільної спінової рідини (із $m \in]0, 0.5[$). Квантові фазові переходи між цими фазами можуть бути лише другого роду. З Рис. 2 та співвідношення для m (див. (3.13), (4.1)) можна бачити, що вирази для критичних точок h_c в основному стані можна отримати, знайшовши екстремальні значення $\lambda_+(q)$. Таким чином маємо:

$$h_{c1,2} = \sqrt{A_{11}^2(q_{extr} + \pi n/2) + A_{12}^2(q_{extr} + \pi n/2)}, \quad (4.7)$$

$$q_{extr} = \frac{1}{2} \arctg \frac{2E_y \cos \theta}{(E_y \cos \theta)^2 - (E_x \sin \theta)^2 - 1}.$$

Тут при певних параметрах покладемо $n = 0, 1$, а при певних беремо $n = 1, 0$, так, щоб задовільнялась умова $h_{c1} < h_{c2}$. Тобто, h_{c1}

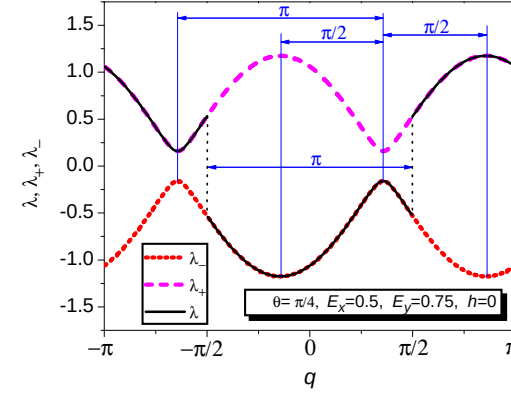


Рис. 2. Спектр λ_q , а також $\lambda_{\pm}$ (3.6) при $h = 0$, $\theta = \pi/4$, $E_x = 0.5$, $E_y = 0.75$. λ_q — суцільна лінія, λ_+ — штрих, λ_- — пунктир.

буде відповідати переходу із магнетоневпорядкованої фази у фазу спінової рідини, а h_{c2} — із фази спінової рідини у фазу з $m = 1/2$.

Розглянемо спочатку фазові діаграми основного стану в площині $(|\mathbf{E}|, h)$ при $\theta = \pi/8, \pi/4$ та різних значеннях кута α , під яким прикладене електричне поле (див. Рис. 3). Зрозуміло, що при $\alpha = \pi/2$ (див. (2.1) та Рис. 1) задача ХУ магнетоелектрика на зигзаг ланцюжку ефективно є задачею ХУ магнетоелектрика на прямому ланцюжку [20, 21], що лежить вздовж осі x і де прикладене поле $\mathbf{E} = (0, E_y, 0)$. Задачу ж на зигзаг ланцюжку при $\alpha = 0$ можна звести (див. (4.3), або (4.6)) до задачі на зигзаг ланцюжку при $\alpha = \pi/2$, а отже і до вищезгаданої задачі ХУ магнетоелектрика на прямому ланцюжку. Тому, як при $\alpha = \pi/2$, так і при $\alpha = 0$ окремої магнетоневпорядкованої фази не існує ($m = 0$ лише при $h = 0$). А отже на фазових діаграмах при $\alpha = 0, \pi/2$ наявні лише лінії, які відповідають квантовим фазовим переходам (при h_{c2}) між фазами з $m \in [0, 1/2[$ та з $m = 1/2$. У випадках ж $\alpha \in]0, \pi/2[$ при $|\mathbf{E}| > 0$ в системі з ростом h відбуватиметься два квантові фазові переходи при h_{c1} та h_{c2} : магнетоневпорядкована фаза $\rightarrow$ фаза спінової рідини $\rightarrow$ фаза з насиченою намагніченістю.

Із Рис. 3 видно, що як $h_{c1}(|\mathbf{E}|, \alpha)$ так і $h_{c2}(|\mathbf{E}|, \alpha)$ є немонотонними функціями α . Окрім того, слід зауважити, що фазові діаграми при $\theta = \pi/8$ та $\theta = \pi/4$ дещо якісно відрізняються. По-перше, при $\theta = \pi/4$ реалізується симетрія (4.3): діаграми, наприклад, при $\alpha = \pi/8$ та $\alpha = 3\pi/8$ співпадають. По-друге, при $\theta = \pi/4$ лінії фазових переходів із

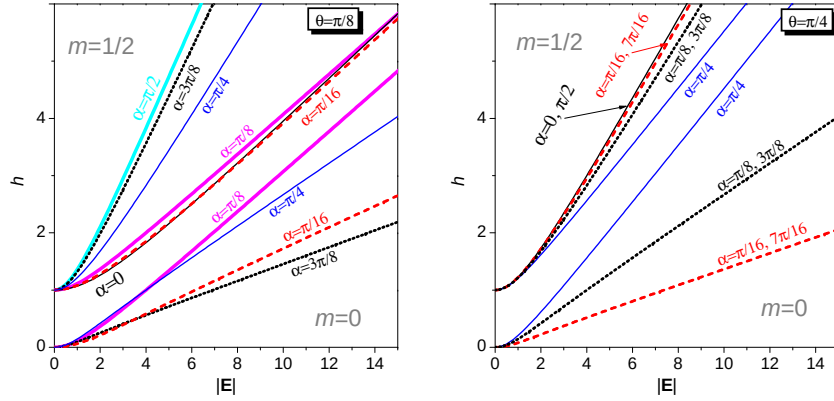


Рис. 3. Фазові діаграми основного стану в площині $(|E|, h)$ для $\theta = \pi/8$ та $\theta = \pi/4$ при різних значеннях кута α , під яким прикладене електричне поле.

фази з $m = 0$ у фазу спінової рідини (або із фази спінової рідини у фазу з $m = 1/2$), які відповідають різним α , не перетинаються між собою. А от при $\theta \neq \pi/4$ можуть перетинатися. Наприклад, у випадку $\theta = \pi/8$ при малих $|E|$ критичне поле $h_{c1}(|E|, \alpha = \pi/16)$ є меншим від $h_{c1}(|E|, \alpha = 3\pi/8)$, а при великих $|E|$ — навпаки.

Розглянемо тепер фазові діаграми основного стану в площині (α, h) при $\theta = \pi/8, 7\pi/32, \pi/4$ та різних значеннях модуля електри-

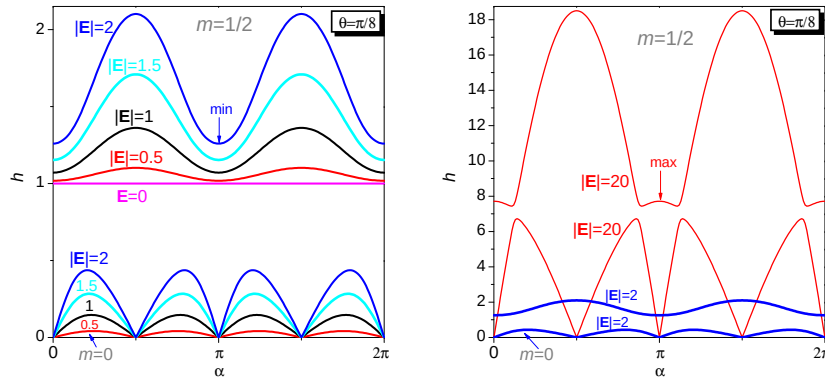


Рис. 4. Фазові діаграми основного стану в площині (α, h) для $\theta = \pi/8$ при різних значеннях модуля електричного поля $|E|$.

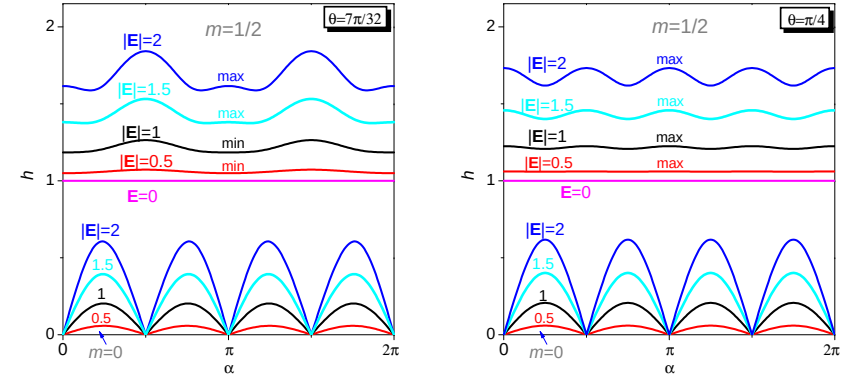


Рис. 5. Фазові діаграми основного стану в площині (α, h) для $\theta = 7\pi/32$ і $\theta = \pi/4$ при різних значеннях модуля електричного поля $|E|$.

чного поля $|E|$. На Рис. 4 представлені результати для випадку $\theta = \pi/8$ при малих та великих $|E|$ (лівий та правий рисунки відповідно), а на Рис. 5 — результати для випадків $\theta = 7\pi/32$ та $\theta = \pi/4$ (знову лівий та правий рисунки). Нижні лінії відповідають квантовим фазовим переходам між магнетоневпорядкованою фазою та фазою спінової рідини, а верхні лінії — переходам між фазою спінової рідини та фазою, де намагніченість є насиченою. Зауважимо, що ми приводимо фазові діаграми на відрізку $\alpha \in [0, 2\pi]$ для наочності. Також звернемо увагу, що при $E = 0$ окремої магнетоневпорядкованої фази не існує ($m = 0$ лише при $h = 0$). Тобто, у випадку $E = 0$ при довільних α та θ в системі зі змінюю h має місце лише один фазовий перехід між фазами з $m \in [0, 1/2[$ та з $m = 1/2$. Подібною ситуація є у випадках $\alpha = \frac{\pi}{2}n$ (де $n = 0, 1, \dots$) при довільних E та θ . Наприклад, при $\alpha = \frac{\pi}{2}$, $\theta = \pi/8$ та $E = 2$ (див. Рис. 4) з ростом h відбуватиметься знову ж таки лише один фазовий перехід з фази спінової рідини у фазу, де намагніченість є насиченою.

Із рисунків 4 та 5 видно, що у випадку $\theta = \pi/4$ існує симетрія відносно прямих $\alpha = \frac{\pi}{4}n$, де $n = 0, 1, \dots$ (тобто, $h_{c1,2}(\alpha)$ є періодичними функціями із періодом $\pi/2$). У випадках ж $\theta < \pi/4$ існує симетрія лише відносно прямих $\alpha = \frac{\pi}{2}n$ (і це «лише» стосується як $h_{c1}(\alpha)$, так і $h_{c2}(\alpha)$). Тобто, обидві функції $h_{c1,2}(\alpha)$ — періодичні з періодом π .

У випадку $\theta = \pi/4$ та $|E| > 0$ лінії верхніх фазових переходів мають максимуми при $\alpha = \frac{\pi}{2}n$ та мінімуми при $\alpha = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2}n$. Лінії ж нижніх фазових переходів — навпаки (мінімуми при $\alpha = \frac{\pi}{2}n$ та максимуми при $\alpha = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2}n$).

У випадках $0 < \theta < \pi/4$ та $|\mathbf{E}| > 0$ ситуація якісно інша. При $\alpha = \frac{\pi}{2} + \pi n$ та будь-яких $|\mathbf{E}| > 0$ лінії верхніх фазових переходів мають максимуми (аналогічно, як у випадку $\theta = \pi/4$), а от при $\alpha = \pi n$ та достатньо малих $|\mathbf{E}|$ — мінімуми (замість максимумів, як при $\theta = \pi/4$). Із збільшенням $|\mathbf{E}|$ відбувається розділення цих мінімумів на максимуми при $\alpha = \pi n$ та по два мінімуми з обох боків. Лінії нижніх фазових переходів при $0 < \theta < \pi/4$ та $|\mathbf{E}| > 0$ мають мінімуми при $\alpha = \frac{\pi}{2}n$ (аналогічно, як у випадку $\theta = \pi/4$), а от максимуми мають вже не при $\alpha = \frac{\pi}{4} + \frac{\pi}{2}n$.

Таким чином можна підсумувати, що на досліджуваному відрізку $\alpha \in [0, \pi/2]$ при $0 < \theta < \pi/4$ та достатньо малих $|\mathbf{E}|$ критичне поле h_{c2} зростає із збільшенням α . При достатньо ж великих $|\mathbf{E}|$ критичне поле $h_{c2}(\alpha)$ вже не є монотонною функцією, так само, як у випадку $\theta = \pi/4$ та $|\mathbf{E}| > 0$. А от критичне поле h_{c1} є немонотонною функцією α при будь-яких $|\mathbf{E}| > 0$ та $\theta \in [0, \pi/4]$. Притому, чим меншим є $|\mathbf{E}|$ та чим більше θ наближається до $\pi/4$, тим більше кут $\alpha_{\max}$, в якому h_{c1} має максимум, наближається до $\pi/4$.

Для кращого розуміння результатів також зауважимо, що фазові діаграми в площині (α, h) при $\theta = \theta_1$ та $\theta = \pi/2 - \theta_1$ є зміщеними горизонтально на $\pi/2$ одна відносно одної (див. співвідношення (4.3)).

Фазові діаграми основного стану в площині (θ, h) є дещо якісно подібними до фазових діаграм в площині (α, h) . На Рис. 6 представлені результати для випадку $\alpha = \pi/8$ при малих та великих $|\mathbf{E}|$ (лівий та правий рисунки відповідно), а на Рис. 7 — результати для випад-

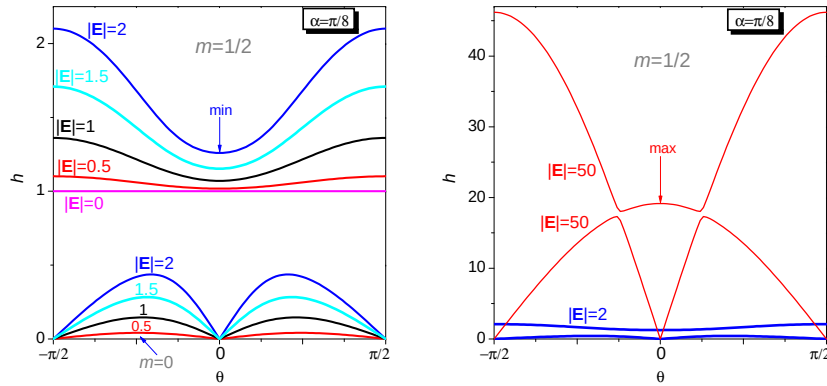


Рис. 6. Фазові діаграми основного стану в площині (θ, h) для $\alpha = \pi/8$ при різних значеннях $|\mathbf{E}|$.

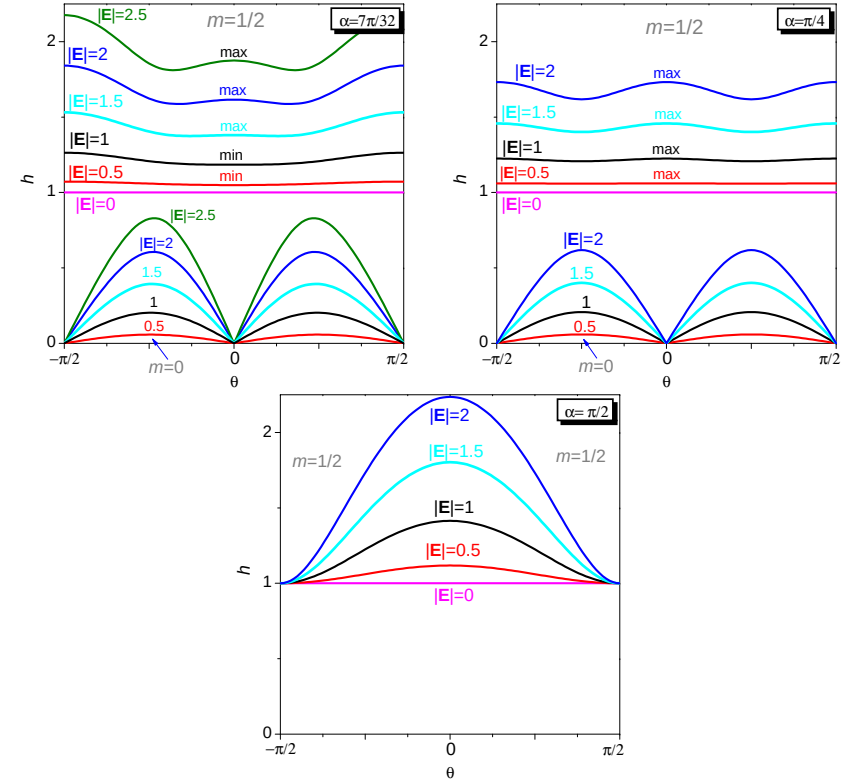


Рис. 7. Фазові діаграми основного стану в площині (θ, h) для $\alpha = 7\pi/32, \pi/4$ та $\pi/2$ при різних значеннях $|\mathbf{E}|$.

ків $\alpha = 7\pi/32, \pi/4, \pi/2$ та різних значень $|\mathbf{E}|$. Нижні лінії, знову ж таки, відповідають квантовим фазовим переходам між магнетонепорядкованою фазою та фазою спінової рідини, а верхні лінії — переходам між фазою спінової рідини та фазою з насиченою намагніченістю. Зауважимо, що ми приводимо фазові діаграми на відрізку $\theta \in [-\pi/2, \pi/2]$ для наочності, а також нагадаємо, що при $\mathbf{E} = 0$ окремої фази із $m = 0$ не існує.

З рисунків 6 та 7 видно, що у випадку $\alpha = \pi/4$ існує симетрія відносно прямих $\theta = 0, \pm \frac{\pi}{4}$, а от у випадках $\alpha \neq \pi/4$ — лише відносно прямої $\theta = 0$ (і це «лише» стосується як $h_{c1}(\theta)$, так і $h_{c2}(\theta)$).

У випадку $\alpha = \pi/4$ та $|\mathbf{E}| > 0$ лінії верхніх фазових переходів $h_{c2}(\theta)$ мають максимуми при $\theta = 0, \pm \frac{\pi}{2}$ та мінімуми при $\theta = \pm \frac{\pi}{4}$.

Лінії ж нижніх фазових переходів $h_{c1}(\theta)$ — навпаки (мінімуми при $\theta = 0, \pm\frac{\pi}{2}$ та максимуми при $\theta = \pm\frac{\pi}{4}$).

При $\alpha \neq \pi/4$ та $|\mathbf{E}| > 0$ ситуація якісно інша. Так у випадках $0 < \alpha < \pi/4$ при $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ та будь-яких $|\mathbf{E}| > 0$ лінії верхніх фазових переходів мають максимуми (аналогічно, як у випадку $\alpha = \pi/4$), а от при $\theta = 0$ та достатньо малих $|\mathbf{E}|$ — мінімуми. Із збільшенням $|\mathbf{E}|$ відбувається розділення цих мінімумів на максимуми при $\theta = 0$ та по два мінімуми з обох боків. Лінії нижніх фазових переходів при $0 < \alpha < \pi/4$ та $|\mathbf{E}| > 0$ мають мінімуми при $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ (аналогічно, як у випадку $\alpha = \pi/4$), а от максимуми мають вже не при $\theta = \pm\frac{\pi}{4}$.

Оскільки, як видно із співвідношення (4.3), фазові діаграми в площині (θ, h) при $\alpha = \alpha_1$ та $\alpha = \pi/2 - \alpha_1$ є зміщеними горизонтально на $\pi/2$ одна відносно одної, то зрозуміло, що у випадках $\pi/4 < \alpha < \pi/2$ при $\theta = 0$ та будь-яких $|\mathbf{E}| > 0$ лінії верхніх фазових переходів мають максимуми, а при $\theta = \pm\frac{\pi}{2}$ — мінімуми (максимуми) при достатньо малих (великих) $|\mathbf{E}|$.

Слід звернути увагу, що на фазовій діаграмі в площині (θ, h) у випадку $\alpha = \pi/2$ (при будь-яких $\mathbf{E}$) реалізуються лише дві фази (з $m \in [0, 1/2[$ та з $m = 1/2$), оскільки, як вже зазначалося вище, у випадках $\alpha = \frac{\pi}{2}n$ ($n = 0, 1, \dots$) ХУ модель магнетоелектрика з геометрією зигзаг ланцюжка ефективно є задачею ХУ магнетоелектрика на прямому ланцюжку [20, 21].

Можемо підсумувати, що на досліджуваному відрізку $\theta \in [0, \pi/4]$ у випадках $\alpha \in]0, \pi/4[$ критичне поле h_{c1} при $|\mathbf{E}| > 0$ є немонотонною функцією θ (із максимумом при $0 < \theta_{\max} < \pi/4$). В той же час функція $h_{c2}(\theta)$ при достатньо малих $|\mathbf{E}|$ є зростаючою, а при достатньо великих — немонотонною (з мінімумом при $0 < \theta_{\min} < \pi/4$). Значення $\theta_{\max}$ та $\theta_{\min}$, при яких h_{c1} та h_{c2} мають екстремуми, тим більше наближаються до $\pi/4$, чим меншим є $|\mathbf{E}|$, та чим більше α наближається до $\pi/4$. У випадках $\alpha \in [\pi/4, \pi/2[$ та $|\mathbf{E}| > 0$ критичні поля є монотонними функціями θ : h_{c1} зростає із збільшенням θ , а h_{c2} — спадає.

Розглянемо тепер залежності від магнітного поля намагніченості m та електричної поляризації (абсолютного значення $|\mathbf{p}|$ та кута між вектором $\mathbf{p}$ та віссю x) з розрахунку на одну частинку (див. рисунки 8–11, а також приведені раніше фазові діаграми). Спочатку зупинимося на результаті (див. Рис. 8) для прямого ланцюжка [20], що лежить вздовж осі x . Ми вибрали кут $\alpha = \pi/8$ для того, щоб було наочніше порівнювати із результатами при $\theta \neq 0$, хоча у даному випадку ($\theta = 0$) кут α лише перенормовує $|\mathbf{E}|$, оскільки на дипольні моменти зв'язків прямого ланцюжка впливає лише компо-

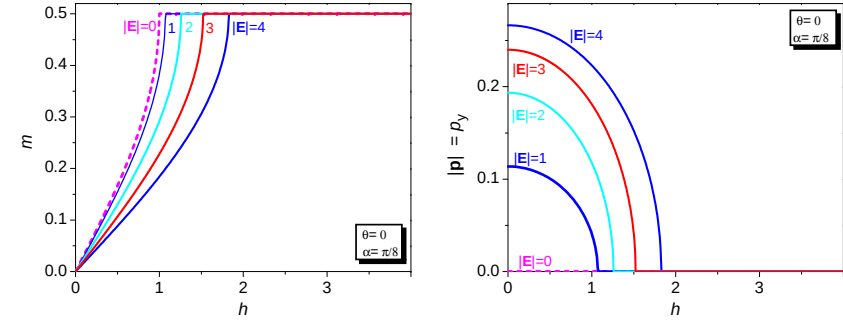


Рис. 8. Залежність намагніченості m та електричної поляризації $|\mathbf{p}| = p_y$ від магнітного поля при $\theta = 0$, $\alpha = \pi/8$ та різних значеннях модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$.

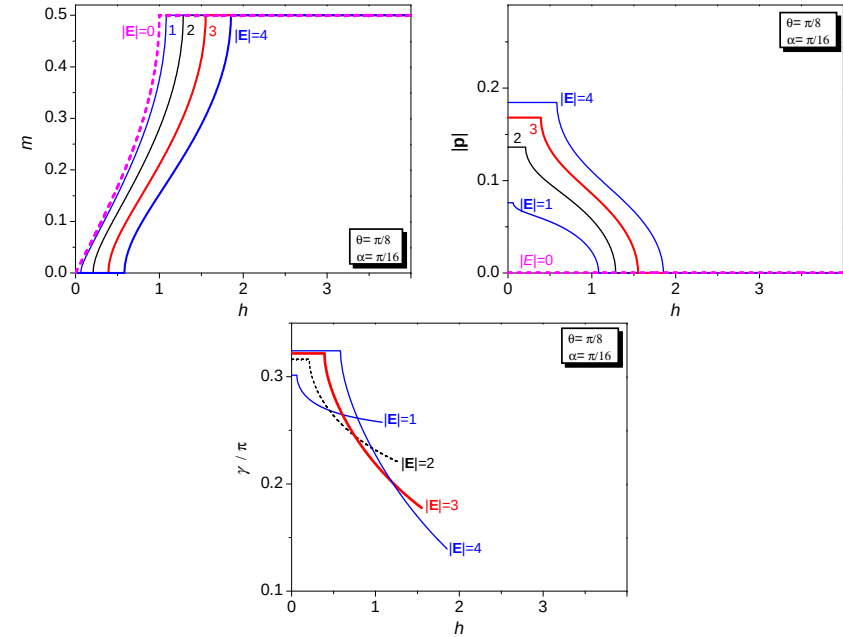


Рис. 9. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$ та γ) від магнітного поля при $\theta = \pi/8$, $\alpha = \pi/16$ та різних значеннях модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$.

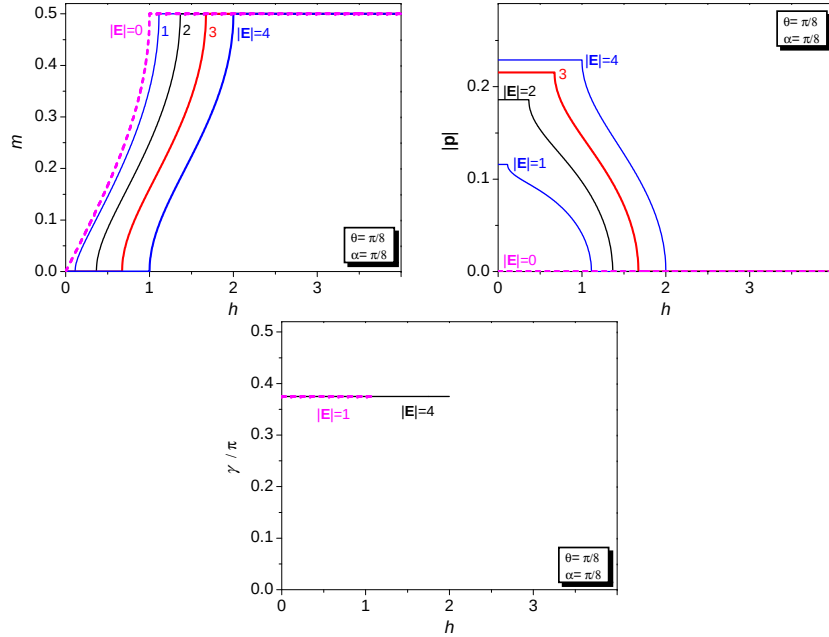


Рис. 10. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|p|$ та γ) від магнітного поля при $\theta = \alpha = \pi/8$ та різних значеннях модуля електричного поля $|E|$.

нента E_y (див. (2.1)). Із Рис. 8 видно, що в системі має місце лише один квантовий фазовий перехід з фази спінової рідини у фазу, де намагніченість є насиченою, а $\mathbf{p} = 0$. Крім того зрозуміло [21], що поляризація прямого ланцюжка є напрямленою вздовж осі y .

Даний результат можна застосувати і до зигзаг ланцюжка, до якого прикладене електричне поле або під кутом $\alpha = 0$, або під кутом $\alpha = \pi/2$, використовуючи такі співвідношення:

$$\begin{aligned}
 m(\theta_{\text{lin}}=0, \alpha_{\text{lin}}, |E|) &= m(\theta_{\text{zg1}}, \alpha_{\text{zg1}}=0, |E|) \cdot \frac{\sin \alpha_{\text{lin}}}{\sin \theta_{\text{zg1}}} \\
 &= m(\theta_{\text{zg2}}, \alpha_{\text{zg2}}=\pi/2, |E|) \cdot \frac{\sin \alpha_{\text{lin}}}{\cos \theta_{\text{zg2}}}, \\
 p_y(\theta_{\text{lin}}=0, \alpha_{\text{lin}}, |E|) &= p_x(\theta_{\text{zg1}}, \alpha_{\text{zg1}}=0, |E|) \cdot \frac{\sin \alpha_{\text{lin}}}{\sin \theta_{\text{zg1}}} \cdot \frac{1}{\sin \theta_{\text{zg1}}} \\
 &= p_y(\theta_{\text{zg2}}, \alpha_{\text{zg2}}=\pi/2, |E|) \cdot \frac{\sin \alpha_{\text{lin}}}{\cos \theta_{\text{zg2}}} \cdot \frac{1}{\cos \theta_{\text{zg2}}},
 \end{aligned} \quad (4.8)$$

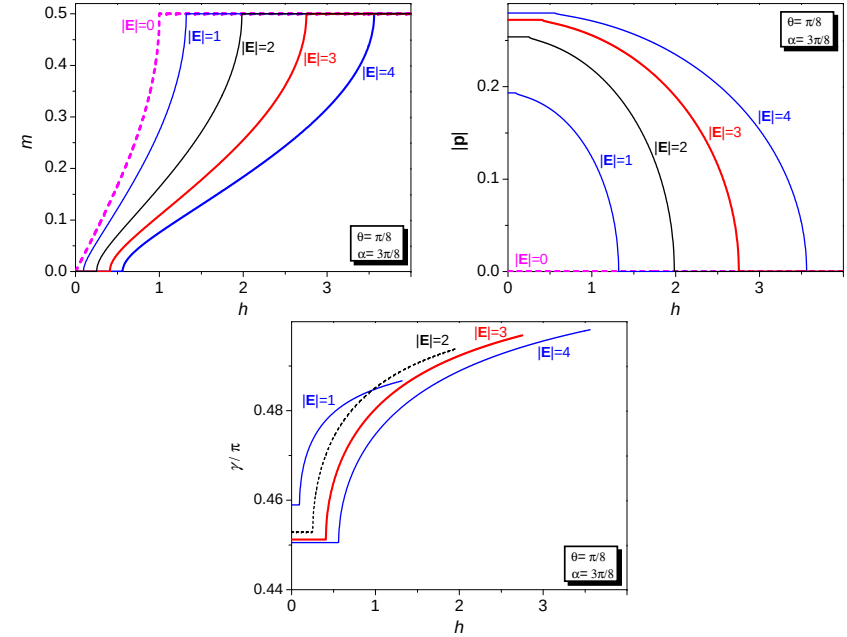


Рис. 11. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|p|$ та γ) від магнітного поля при $\theta = \pi/8$, $\alpha = 3\pi/8$ та різних значеннях модуля електричного поля $|E|$.

$$p_x(\theta_{\text{lin}}=0) = p_y(\alpha_{\text{zg1}}=0) = p_x(\alpha_{\text{zg2}}=\pi/2) = 0.$$

Тобто для зигзаг ланцюжка у випадках, коли електричне поле прикладене під кутами $\alpha = 0$, або $\alpha = \pi/2$, зі зміною магнітного поля в системі відбувається лише один фазовий перехід (з фази спінової рідини у фазу з $m = 1/2$), причому зрозуміло, що при $\alpha = 0$ поляризація є напрямленою вздовж осі x , а при $\alpha = \pi/2$ — вздовж осі y .

Результати при $\theta \neq 0$, $0 < \alpha < \pi/2$ якісно відрізняються від описаних вище випадків. Зі зміною магнітного поля в системі мають місце два квантові фазові переходи (див. рисунки 9–11). Важливо відзначити, що у магнетоневпорядкованій фазі, електрична поляризація не залежить від h :

$$\mathbf{p}(\theta, \mathbf{E}, h) = \mathbf{p}(\theta, \mathbf{E}, 0), \quad \text{при } \theta, \mathbf{E} \text{ та } h, \text{ при яких } m = 0. \quad (4.9)$$

У фазі ж із $m = 1/2$ електрична поляризація є нульовою (аналогічно,

як і у прямому ланцюжку):

$$\mathbf{p}(\theta, \mathbf{E}, h) = 0, \quad \text{при } \theta, \mathbf{E} \text{ та } h, \text{ при яких } m = 1/2. \quad (4.10)$$

Також слід зауважити, що у фазі спінової рідини при $0 < \alpha < \theta$ кут вектора електричної поляризації відносно осі x є спадною функцією h (Рис. 9); при $\theta < \alpha < \pi/2$ — зростаючою функцією магнітного поля (Рис. 11); а при $\alpha = \theta$ кут γ не залежить ні від h , ні від $|\mathbf{E}|$ (Рис. 10). Для кращого розуміння результатів у цілому слід зауважити, що те, що сказано вище, стосується не лише проміжку $\theta \in]0, \pi/4[$, яким ми обмежилися, але і більш широкого проміжку $\theta \in]0, \pi/3[$.

Залежностей компонент електричної поляризації p_x та p_y від h ми тут не приводимо. Вони є в певній мірі подібними до $|\mathbf{p}(h)|$ при відповідних α та θ . Як $p_x(h)$, так і $p_y(h)$ не залежать від h у магнетоневпорядкованій фазі; дорівнюють нулеві у фазі з $m = 1/2$; є спадними функціями h у фазі спінової рідини; мають злами у точках фазових переходів. Суттєвою відмінністю $p_x(h)$, $p_y(h)$ та $|\mathbf{p}(h)|$ між собою є їх різні кількісні значення, а також різні h , при яких вони у фазі спінової рідини мають перегини. Так, наприклад, у випадку $|\mathbf{E}| = 10$, $\alpha = \pi/16$ та $\theta = \pi/8$ компонента поляризації $p_x(h)$ має перегин при магнітному полі близькому до h_{c1} , компонента $p_y(h)$ — при h близькому до h_{c2} , а модуль $|\mathbf{p}(h)|$ — десь посередині. У випадку ж $|\mathbf{E}| = 4$, $\alpha = 3\pi/8$ та $\theta = \pi/8$ компонента поляризації $p_y(h)$ та модуль поляризації $|\mathbf{p}(h)|$ мають перегини при різних значеннях магнітного поля близьких до h_{c1} , а компонента $p_x(h)$ — при h близькому до h_{c2} .

Розглянемо тепер залежності намагніченості m та електричної поляризації (абсолютного значення $|\mathbf{p}|$ та кута між $\mathbf{p}$ та віссю x) з

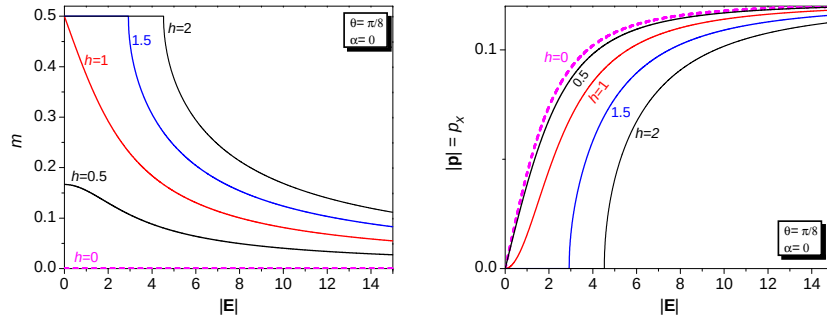


Рис. 12. Залежність намагніченості m та електричної поляризації $|\mathbf{p}| = p_x$ від модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$ при $\theta = \pi/8$, $\alpha = 0$ та різних значеннях магнітного поля h .

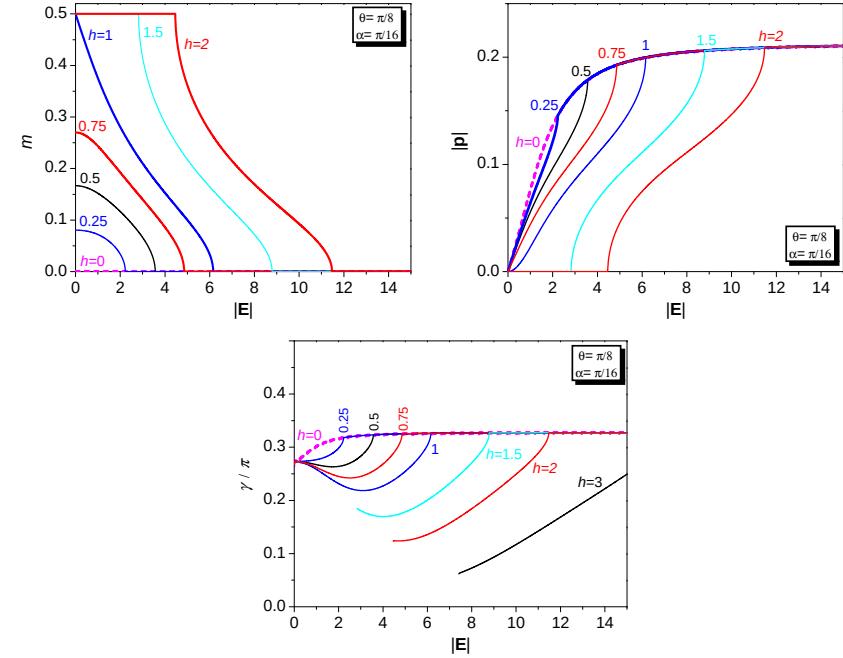


Рис. 13. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$ та γ) від модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$ при $\theta = \pi/8$, $\alpha = \pi/16$ та різних значеннях магнітного поля h .

розрахунку на одну частинку від модуля електричного поля (див. Рис. 12–16).

На Рис. 12 приведені результати для випадку $\theta = \pi/8$, $\alpha = 0$. Як вже зазначалося вище, даний результат можна застосувати як до прямого ланцюжка, який лежить вздовж осі x і до якого прикладене електричне поле під довільним кутом, так і до зигзаг ланцюжка, до якого прикладене електричне поле під кутом $\alpha = \pi/2$, використовуючи співвідношення (4.8). Тобто, як у зигзаг ланцюжку у випадках $\alpha = 0, \pi/2$, так і у прямому ланцюжку зі зміною величини електричного поля при $h \geq 1$ відбувається лише один фазовий перехід із фази з $m = 1/2$ та $|\mathbf{p}| = 0$ у фазу з $m \in [0, 1/2[$, причому у фазі спінової рідини $m \rightarrow 0$ лише при безмежно великих $|\mathbf{E}|$. У точці фазового переходу залежності $m(|\mathbf{E}|)$ та $|\mathbf{p}(|\mathbf{E}|)|$ мають злами. При магнітних полях ж $h < 1$ система при будь-яких $|\mathbf{E}|$ перебуває у фазі спінової рідини. (див. також Рис. 3–7).

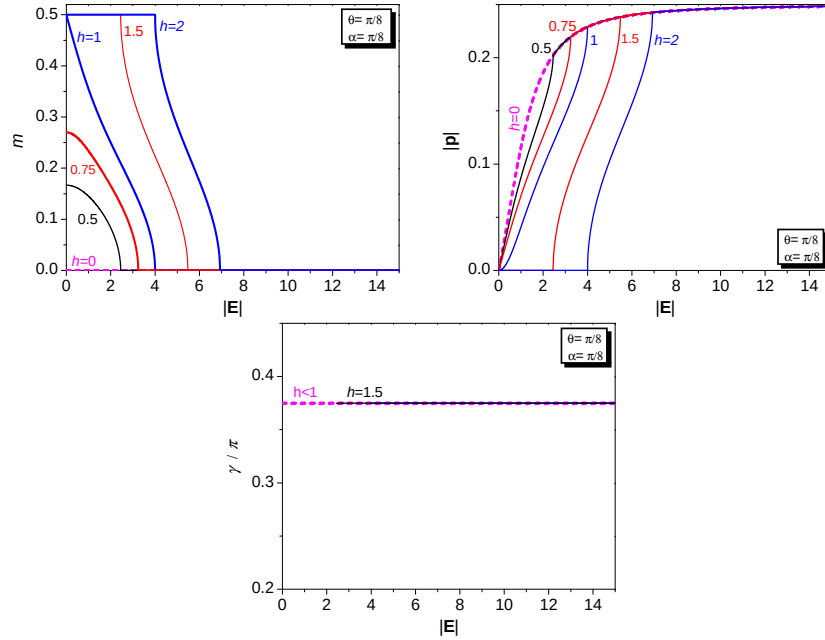


Рис. 14. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$ та γ) від модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$ при $\theta = \alpha = \pi/8$ та різних значеннях магнітного поля h .

Результати при $\theta \neq 0$, $0 < \alpha < \pi/2$ якісно відрізняються від описаних вище випадків. У системі з'являється додатковий фазовий перехід зі зміною величини електричного поля з фази спінової рідини у магнетоневпорядковану фазу (див. рисунки 13–16). Зауважимо, що ми не приводимо залежностей x та y компонент електричної поляризації від $|\mathbf{E}|$, оскільки вони якісно подібні до залежностей $|\mathbf{p}|(|\mathbf{E}|)$.

Із Рис. 13–16 видно, що у фазі спінової рідини $m(|\mathbf{E}|)$ може мати один або два перегини, а може і не мати жодного, будучи опуклою вверх функцією $|\mathbf{E}|$ (див. наприклад намагніченість для $\theta = \pi/4$, $\alpha = \pi/8$ при $h = 2.5$, $h = 0.75$ та $h = 0.5$). Кількість перегинів функції $|\mathbf{p}|(|\mathbf{E}|)$ у фазі спінової рідини також може бути різною. Наприклад, у випадку $\theta = \pi/8$, $\alpha = \pi/16$ при $h = 0.25$ та $h = 1.5$ є по одному перегину, а при $h = 1$ — два.

Також слід, по-перше, відзначити, що те, що модуль електричної поляризації та кут її нахилу у магнетоневпорядкованій фазі при $h \neq 0$ дорівнюють, відповідно, значенням $|\mathbf{p}|(|\mathbf{E}|)$ та $\gamma(|\mathbf{E}|)$ при

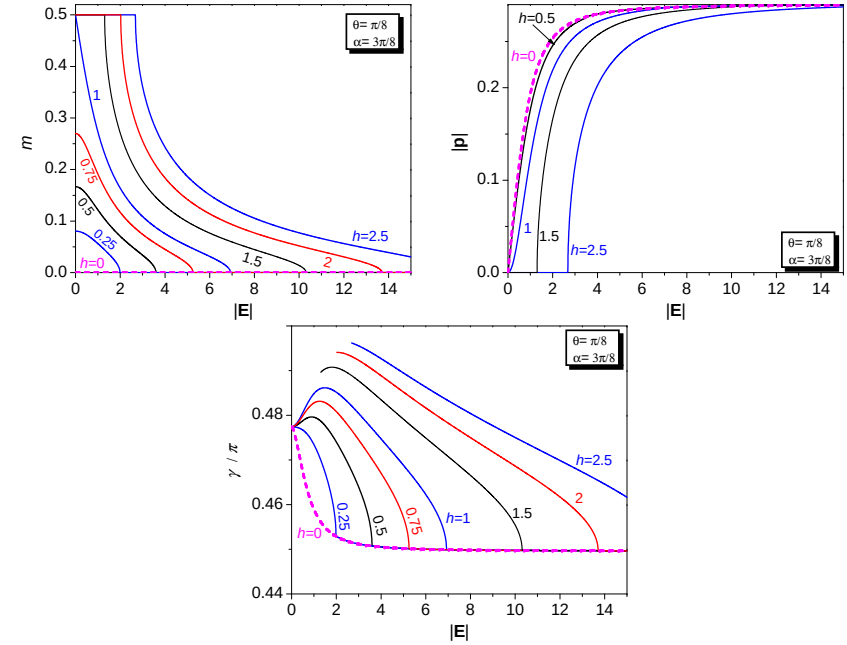


Рис. 15. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$ та γ) від модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$ при $\theta = \pi/8$, $\alpha = 3\pi/8$ та різних значеннях магнітного поля h .

$h = 0$ (та при тих же кутах θ і α), відображає співвідношення (4.9). По-друге, у фазі спінової рідини залежності кута нахилу електричної поляризації від величини електричного поля при $\alpha < \theta$ можуть бути немонотонними функціями з одним мінімумом, або монотонно зростаючими (див. Рис. 13, 16). При $\alpha > \theta$ функція $\gamma(|\mathbf{E}|)$ може бути немонотонною з одним максимумом, або монотонно спадною (Рис. 15). При $\alpha = \theta$ (Рис. 14) кут γ , як зазначалось раніше, не залежить ні від $|\mathbf{E}|$ ні від h . По-третє, у випадку зигзаг ланцюжка із $\theta = \pi/4$ при $\mathbf{E} \rightarrow 0$ маємо $\gamma \rightarrow \alpha$ (див. Рис. 16).

Тепер коротко зупинимося на залежностях намагніченості та електричної поляризації від кутів α та θ , які є значно складнішими від описаних вище залежностей від h та $|\mathbf{E}|$. Спочатку розглянемо залежності від кута, під яким прикладене електричне поле (див. рисунки 17–19). Ми тут обмежуємося найбільш цікавими випадками, хоча слід зауважити, що при інших наборах параметрів поведінка дослі-

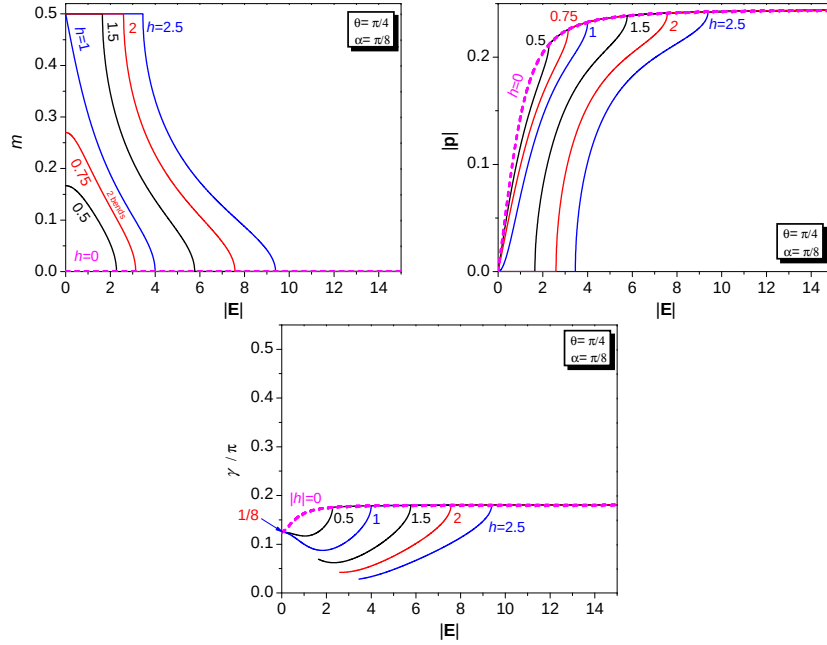


Рис. 16. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$ та γ) від модуля електричного поля $|\mathbf{E}|$ при $\theta = \pi/4$, $\alpha = \pi/8$ та різних значеннях магнітного поля h .

джуваних величин може дещо якісно відрізнитись від приведених тут.

У випадку $\theta = \pi/8$, $|\mathbf{E}| = 2$ (Рис. 17) при достатньо великих h система перебуває при будь-яких α у фазі з $m = 1/2$, а при $h = 0$ — в магнетоневпорядкованій фазі. При проміжних значеннях магнітного поля зі зміною α в системі може відбуватись два фазові переходи між магнетоневпорядкованою фазою та фазою спінової рідини, один фазовий перехід між фазою з $m = 1/2$ та фазою спінової рідини, або жодного (система знаходиться у фазі спінової рідини при будь-яких α). У точках фазових переходів $m(\alpha)$, $|\mathbf{p}(\alpha)|$, $\gamma(\alpha)$, а також x та y компоненти поляризації мають злами.

При значеннях магнітного поля, коли в системі відбувається перехід між фазами з $m = 1/2$ та $m \in [0, 1/2]$, намагніченість у фазі спінової рідини є монотонно спадною функцією α , а модуль електричної поляризації $|\mathbf{p}(\alpha)|$ — монотонно зростаючою, причому як $m(\alpha)$,

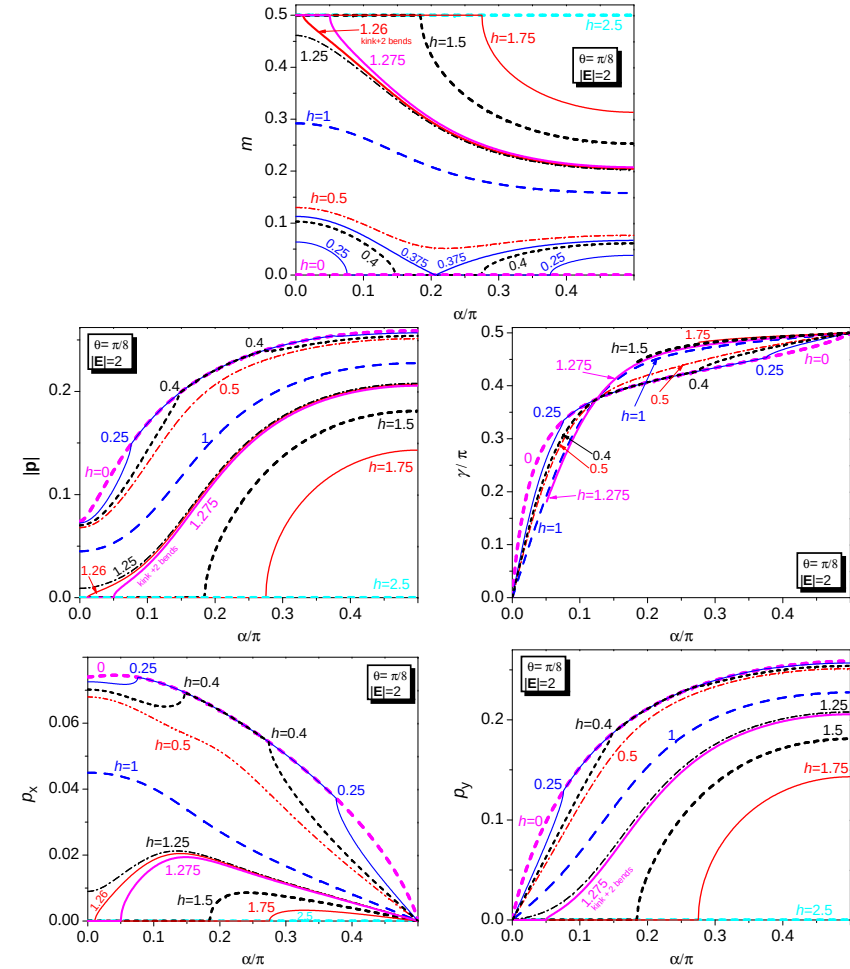


Рис. 17. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$, p_x , p_y та γ) від кута α , під яким прикладене електричне поле, при $\theta = \pi/8$, $|\mathbf{E}| = 2$ та різних значеннях h .

так і $|\mathbf{p}(\alpha)|$ можуть мати по два перегиби (наприклад, при $h = 1.26$ для m та при $h = 1.275$ для $|\mathbf{p}|$), або не мати жодного.

При значеннях h , коли система знаходиться у фазі спінової рідини при будь-яких α , намагніченість може бути монотонно спадною функцією α (при $h = 1.25$), або ж немонотонною з одним мінімумом

(при $h = 0.5$). Модуль ж електричної поляризації $|\mathbf{p}(\alpha)|$ може бути лише монотонно зростаючою функцією.

При значеннях магнітного поля, коли зі зміною кута α мають місце два фазові переходи між магнетоневпорядкованою фазою та фазою з $m \in]0, 1/2[$, намагніченість у фазі спінової рідини в основному є випуклою вгору функцією (як зліва від першого переходу, так і справа від другого). Хоча при певних h намагніченість може мати перегини (наприклад, при $h = 0.375$ зліва від першого переходу). Модуль ж електричної поляризації $|\mathbf{p}(\alpha)|$ зліва від першого фазового переходу є монотонно зростаючою функцією, а справа від другого переходу може бути немонотонною функцією з одним мінімумом (наприклад, при $h = 0.4$).

Цікавими також є залежності $p_x(\alpha)$ та $p_y(\alpha)$. Зокрема, x компонента електричної поляризації поводить себе якісно зовсім інакше від відповідних $|\mathbf{p}(\alpha)|$ та $p_y(\alpha)$. Зупинюся коротко на найсуттєвіших відмінностях.

- При $h = 0$ компонента $p_x(\alpha)$ є немонотонною функцією з одним максимумом при $\alpha > 0$. Більше того, на більшій частині відрізка $\alpha \in [0, \pi/2]$ величина $p_x(\alpha)$ спадає (на відміну від $|\mathbf{p}(\alpha)|$ та $p_y(\alpha)$, які зростають).
- При значеннях магнітного поля, коли зі зміною кута α мають місце два фазові переходи між магнетоневпорядкованою фазою та фазою спінової рідини, $p_x(\alpha)$ зліва від першого фазового переходу може бути немонотонною функцією (при $h = 0.25, 0.4$).
- При значеннях h , коли система при будь-яких α знаходиться у фазі спінової рідини, компонента $p_x(\alpha)$ може спадати (при $h = 0.5, 1$), або ж бути немонотонною функцією (при $h = 1.25$).
- При значеннях магнітного поля, коли в системі відбувається перехід між фазами з $m = 1/2$ та $m \in]0, 1/2[$, компонента $p_x(\alpha)$ у фазі спінової рідини знову ж таки є немонотонною функцією.

Поведінки $p_y(\alpha)$ при різних магнітних полях є дуже подібними до відповідних поведінок $|\mathbf{p}(\alpha)|$. Суттєвою відмінністю є те, що при будь-яких значеннях магнітного поля $p_y(\alpha = 0)$ є рівні нулеві.

Слід також зауважити таке.

- Те, що криві $\gamma(\alpha)$, які відповідають різним h , перетинаються у точці $\alpha = \theta$, відповідає тому, що при $\alpha = \theta$ кут нахилу електричної поляризації γ не залежить від h .
- Те, що при фіксованих θ та $|\mathbf{E}|$ вектор електричної поляризації $\mathbf{p}$ (а значить і окремо всі $|\mathbf{p}|$, γ , p_x та p_y) у магнетоневпорядкованій фазі при $h \neq 0$ співпадає з вектором $\mathbf{p}$ при $h = 0$, відображає співвідношення (4.9).

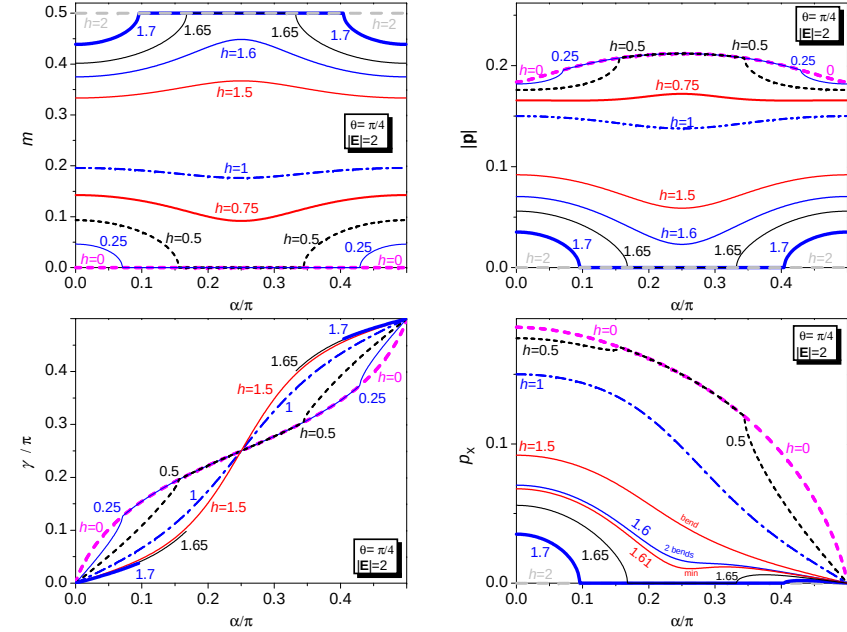


Рис. 18. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$, p_x та γ) від кута α , під яким прикладене електричне поле, при $\theta = \pi/4$, $|\mathbf{E}| = 2$ та різних значеннях h .

При $\theta = \pi/4$ та $|\mathbf{E}| = 2$ (див. Рис. 18) маємо певні якісні відмінності у порівнянні з розглянутим вище випадком $\theta = \pi/8$ та $|\mathbf{E}| = 2$. Перечислимо основні із них.

- У випадку $\theta = \pi/4$, $|\mathbf{E}| = 2$ криві $m(\alpha)$ та $|\mathbf{p}(\alpha)|$ є симетричними відносно прямих $\alpha = \pi/4$. Для $\gamma(\alpha)$ ж має місце інверсія відносно точки $\alpha = \pi/4$, $\gamma = \pi/4$.
- При певних полях ($h = 1.7, 1.65$; Рис. 18) зі зміною α можуть відбуватися два фазові переходи (а не лише один; Рис. 17) між фазою з $m = 1/2$ та фазою спінової рідини.
- При значеннях h , при яких система перебуває у фазі спінової рідини на всьому відрізку $\alpha \in [0, \pi/2]$, намагніченість та модуль вектора електричної поляризації обов'язково є немонотонними (див. Рис. 18), причому лише з одним екстремумом на інтервалі $\alpha \in]0, \pi/2[$ (мінімумом, або ж максимумом). Хоча є винятки. $m(\alpha)$ є константою при певному значенні магнітного поля (між $h = 1$ та $h = 1.5$), а $|\mathbf{p}(\alpha)|$ — при іншому (між $h = 0.75$ та $h = 1$).

- У магнетоневпорядкованій фазі (див. випадки $h = 0, 0.25, 0.5$ на Рис. 18) модуль електричної поляризації є немонотонною функцією з максимумом при $\alpha = \pi/4$.
- Якщо у випадку $\theta = \pi/8$ та $|\mathbf{E}| = 2$ кут нахилу вектора електричної поляризації γ в основному є більшим від кута α , під яким прикладене електричне поле, то у випадку $\theta = \pi/4$ та $|\mathbf{E}| = 2$ ситуація інша. На інтервалі $\alpha \in]0, \pi/4[$ при достатньо малих (достатньо великих) магнітних полях маємо $\gamma > \alpha$ ($\gamma < \alpha$). На інтервалі ж $\alpha \in]\pi/4, \pi/2[$ — навпаки ($\gamma < \alpha$ при малих h , $\gamma > \alpha$ при великих h).

Розглянемо тепер залежності компонент поляризації від кута α . Очевидно, що у випадку $\theta = \pi/4$ має місце така симетрія: $p_y(\alpha) = p_x(-\alpha + \pi/2)$. Тому приводимо на Рис. 18 лише $p_x(\alpha)$. Оскільки відмінності між $p_x(\alpha)$ та $|\mathbf{p}(\alpha)|$ є очевидними, то звернемо лише увагу на те, що у фазі спінової рідини при $h = 0.5$ зліва від першого фазового переходу $p_x(\alpha)$ є немонотонною функцією. При $h = 1.5$ та $h = 1.6$ x компонента електричної поляризації має один та два перегиби відповідно.

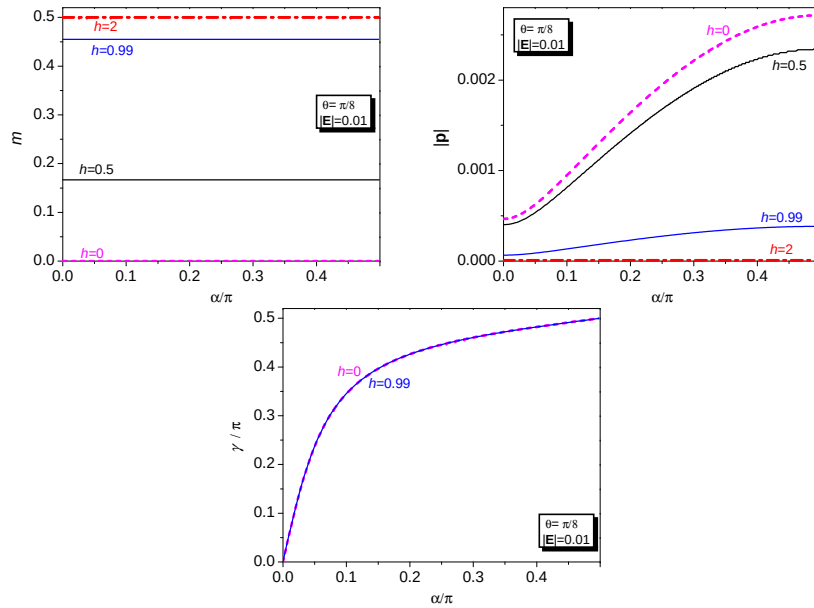


Рис. 19. Залежність намагніченості m та електричної поляризації ($|\mathbf{p}|$, γ) від кута α , під яким прикладене електричне поле, при $\theta = \pi/8$, $|\mathbf{E}| = 0.01$ та різних значеннях h .

У випадках дуже малих електричних полів (див. Рис. 19), природно, намагніченість практично не залежить від кута α . Модуль електричної поляризації є дуже малим. Цікавим є те, що у цих випадках кут нахилу вектора електричної поляризації практично не залежить від h . Притому зрозуміло, що при θ суттєво меншому від $\pi/4$ криві $\gamma(\alpha)$ лежать вище від діагоналі, а при $\theta \approx \pi/4$ будуть лише слабо відхилятися від неї. Зокрема $\gamma(\alpha) \rightarrow \alpha$ при $|\mathbf{E}| \rightarrow 0$ та $\alpha \rightarrow \pi/4$. Окрім того, для кращого розуміння результатів у цілому, зауважимо, що при θ суттєво більшому від $\pi/4$ (але меншому від $\pi/2$) у випадках дуже малих $|\mathbf{E}|$ криві $\gamma(\alpha)$ лежатимуть нижче від діагоналі.

На останок дуже коротко розглянемо (див. Рис. 20) залежності намагніченості та електричної поляризації від кута θ , який характеризує геометрію ланцюжка. Ми приводимо результати на відрізку $\theta \in [0, \pi/2]$ для наочності, хоча, як вже зазначалося вище, з фізичних міркувань кут θ не повинен перевищувати $\pi/3$, а через певну симетрію задачі можна би було взагалі обмежитись значеннями $\theta < \pi/4$.

Зразу зауважимо, що результати для $m(\theta)$ узгоджуються з відповідними результатами для $m(\alpha)$, що відображає співвідношення (4.6). Тому тут не будемо повторювати те, які фазові переходи при яких параметрах мають місце у системі, і як поводить себе $m(\theta)$ при різних α , h та $|\mathbf{E}|$. Поведінка ж $\mathbf{p}(\theta)$ якісно відрізняється від $\mathbf{p}(\alpha)$. Акцентуємо увагу лише на найцікавіших властивостях $|\mathbf{p}(\theta)|$.

У випадку $\alpha = \pi/8$ та $|\mathbf{E}| = 2$ (див. Рис. 20, перший стовпчик) при $h = 0$ модуль поляризації $|\mathbf{p}(\theta)|$ є немонотонною функцією, яка має два екстремуми на проміжку $\theta \in]0, \pi/2[$. При $h = 0.4$ у фазі спінової рідини як лівіше від нещодавнього фазового переходу, так і правіше від другого, $|\mathbf{p}(\theta)|$ має по одному мінімуму. При значеннях магнітного поля, при яких система перебуває у стані спінової рідини на всьому відрізку $\theta \in [0, \pi/2]$, модуль електричної поляризації може бути немонотонною функцією θ з одним (при $h = 0.5, 1$), або двома (при $h = 1.17$) екстремумами на проміжку $\theta \in]0, \pi/2[$, або ж монотонно зростаючою функцією з трьома перегибами (при $h = 1.25$). При значеннях магнітного поля, при яких зі зміною θ відбувається фазовий перехід між фазами з $m = 1/2$ та з $m \in]0, 1/2[$, у фазі спінової рідини функція $|\mathbf{p}(\theta)|$ є монотонно зростаючою, причому може мати перегиби (при $h = 1.26, 1.3$), а може і не мати (при $h = 1.75$).

Порівняємо тепер результати для $|\mathbf{p}(\theta)|$ у випадку $\alpha = \pi/4$ та $|\mathbf{E}| = 2$ (див. Рис. 20, другий стовпчик) з результатами при $\alpha = \pi/8$ та $|\mathbf{E}| = 2$ (Рис. 20, перший стовпчик). По-перше, при $\alpha = \pi/4$

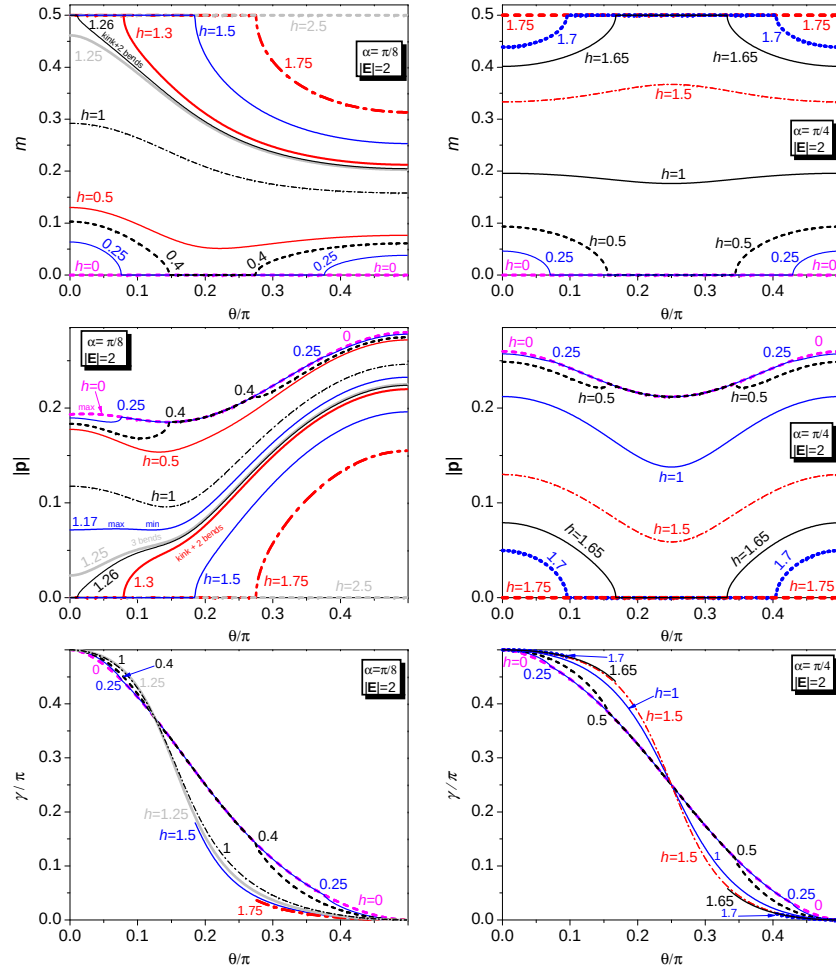


Рис. 20. Залежність намагніченості m та електричної поляризації $(|p|, \gamma)$ від кута θ при $|\mathbf{E}| = 2$, $\alpha = \pi/8, \pi/4$ та різних значеннях магнітного поля h .

залежність модуля електричної поляризації від кута θ при $h = 0$ є немонотонною функцією лише з одним мінімумом на проміжку $\theta \in]0, \pi/2[$. У наслідок цього тепер неможлива ситуація, коли зразу після першого фазового переходу із фази спінової рідини у фазу з $m = 1/2$ величина $|\mathbf{p}(\theta)|$ буде зростаючою. Таке є можливе у випадку $\alpha = \pi/8$

при певних h (наприклад, при достатньо малих h , результати при яких ми не привели, щоб не загроможувати рисунок). По-друге, у випадку $\alpha = \pi/4$ залежності $|\mathbf{p}(\theta)|$ є симетричними відносно прямої $\theta = \pi/4$. По-третє, в системі можливі при певних магнітних полях зі зміною θ два фазові переходи (замість одного) між фазами з $m = 1/2$ та з $m \in]0, 1/2[$. По-четверте, при значеннях h , коли система знаходиться у стані спінової рідини на всьому відрізку $\theta \in [0, \pi/2]$, модуль поляризації може бути лише немонотонною функцією θ з одним екстремумом (мінімумом) на проміжку $\theta \in]0, \pi/2[$.

Якщо ж порівняти ці залежності $|\mathbf{p}(\theta)|$ при $h = 1, 1.5$ (Рис. 20, другий стовпчик) із залежностями $|\mathbf{p}|$ від кута α у випадку $\theta = \pi/4$, $|\mathbf{E}| = 2$ при магнітних полях, коли в системі також відсутній фазовий перехід (див. Рис. 18, $h = 0.75, 1$), то екстремум $|\mathbf{p}(\alpha)|$ на відрізку $\alpha \in]0, \pi/2[$ може бути не лише мінімумом, а й максимумом.

Зауважимо, що залежності $p_x(\theta)$ та $p_y(\theta)$ при певних значеннях параметрів моделі є достатньо складними. Ми їх у даній роботі не приводимо.

5. Висновки

В роботі було отримано точні результати для намагніченості та електричної поляризації спін-1/2 XY моделі магнетоелектрика з геометрією зигзаг ланцюжка, який лежить вздовж осі x і до якого прикладено електричне поле, перпендикулярне до осі z . У випадку нульової температури детально проаналізовано фазові діаграми у різних площинах $(|\mathbf{E}|, h)$, (α, h) , (θ, h) , а також залежності намагніченості та електричної поляризації від параметрів моделі. Коротко перерахуємо основні висновки, які можна зробити із проведеного дослідження впливу геометрії зигзаг ланцюжка на властивості основного стану.

- В даній моделі при нульовій температурі можуть реалізуватись три фази: магнетоневпорядкована, фаза безщільної спінової рідини та фаза з насиченою намагніченістю. Квантові фазові переходи можуть бути лише другого роду.
- Задача зигзаг ланцюжка у випадках, коли електричне поле є напрямлене паралельно, або перпендикулярно до осі, вздовж якої лежить цей ланцюжок, ефективно є задачею прямого ланцюжка.
- При заміні кута α , під яким прикладається електричне поле, на $-\alpha$, або $\pi \pm \alpha$ результати для намагніченості та модулів x, y компонент електричної поляризації не змінюються.
- При одночасній заміні кута θ , що характеризує геометрію зигзаг ланцюжка, та кута α , під яким прикладається електричне поле, на

$\pi/2 - \theta$ та $\pi/2 - \alpha$, відповідно, намагніченість та модуль електричної поляризації не змінюються.

- При заміні значень кута, під яким прикладене електричне поле, та кута, що характеризує геометрію ланцюжка, між собою намагніченість не змінюється.
- Магнітне (електричне) поле руйнує електричний дипольний (магнітний) порядок.
- Якщо кут нахилу електричного поля співпадає із кутом, що характеризує геометрію зигзаг ланцюжка ($\alpha = \theta$), тоді кут нахилу електричної поляризації не залежить ні від магнітного поля, ні від модуля електричного.
- У фазі безпідлинної спінової рідини при $\alpha < \theta$ кут нахилу електричної поляризації є спадною функцією магнітного поля, а при $\alpha > \theta$ — зростаючою.
- При дуже малих значеннях електричного поля кут нахилу електричної поляризації γ слабо залежить від магнітного поля, причому при $\alpha \rightarrow \pi n/2$ ($n = 0, 1, \dots$) маємо $\gamma \rightarrow \alpha$. Більше того, при $|\mathbf{E}| \rightarrow 0$, $\theta \rightarrow \pi/4$ маємо $\gamma \rightarrow \alpha$ при будь-яких α .
- У магнетоневпорядкованій фазі електрична поляризація природно не залежить від магнітного поля. У фазі ж, в якій намагніченість є насиченою, зрозуміло, що електричне дипольне впорядкування є відсутнім.
- Кут вектора електричної поляризації може бути немонотонною функцією модуля електричного поля.
- Модуль та x , y компоненти електричної поляризації, можуть бути немонотонними функціями як кута нахилу електричного поля (на відрізок $\alpha \in [0, \pi/2]$), так і кута, що характеризує геометрію зигзаг ланцюжка (на проміжку $\theta \in [0, \pi/3]$).

Подяки. Робота виконувалась за підтримки Міжнародного центру теоретичної фізики ім. Абдуса Салама (ICTP Network NT-04).

Література

1. Y. Tokura, Sh. Seki, N. Nagaosa. Multiferroics of spin origin. // Rep. Prog. Phys. vol. 77, 076501 (2014).
2. K. F. Wang, J.-M. Liu, Z. F. Ren. Multiferroicity: the coupling between magnetic and polarization orders. // Adv. Phys. vol. 58 No 4, 321-448 (2009).
3. D. I. Khomskii, *Transition metal compounds* (Cambridge, Cambridge University Press, 2014, 487 p.)

4. *Multiferroic materials: properties, techniques, and applications* (Series in materials science and engineering), Edited by J. Wang (CRC Press, Taylor & Francis Group, 2017, 392 p.)
5. I. V. Solovyev, T. V. Kolodiaznyi. Experimental and first-principles studies of magnetism and magnetoelectric effect in $\text{Co}_4\text{Nb}_2\text{O}_9$ and $\text{Co}_4\text{Ta}_2\text{O}_9$. // Phys. Rev. B vol. 94, 094427 (2016); D. I. Badrtdinov, O. S. Volkova, A. A. Tsirlin, I. V. Solovyev, A. N. Vasiliev, V. V. Mazurenko. Hybridization and spin-orbit coupling effects in quasi-one-dimensional spin-1/2 magnet $\text{Ba}_3\text{Cu}_3\text{Sc}_4\text{O}_{12}$. // Phys. Rev. B vol. 94, 054435 (2016).
6. И. Е. Дзялошинский. К вопросу о магнитно-электрическом эффекте в антиферромагнетиках. // ЖЭТФ, т. 37 вып. 3, 881-882 (1959) [I. E. Dzyaloshinskii. On the magneto-electrical effect in anti-ferromagnets // Sov. Phys. JETP vol. 10 No 3, 628-629 (1960)].
7. D. N. Astrov. The Magnetoelectric Effect in Antiferromagnetics. // Sov. Phys. JETP vol. 11 No 3, 708-709 (1960).
8. H. Katsura, N. Nagaosa, A. V. Balatsky. Spin current and magnetoelectric effect in noncollinear magnets. // Phys. Rev. Lett. vol. 95, 057205 (2005).
9. I. A. Sergienko, E. Dagotto. Role of the Dzyaloshinskii-Moriya interaction in multiferroic perovskites. // Phys. Rev. B vol. 73, 094434 (2006).
10. S. Seki, T. Kurumaji, S. Ishiwata, H. Matsui, H. Murakawa, Y. Tokunaga, Y. Kaneko, T. Hasegawa, Y. Tokura. Cupric chloride CuCl_2 as an $S=1/2$ chain multiferroic. // Phys. Rev. B vol. 82, 064424 (2010).
11. S. Seki, Y. Yamasaki, M. Soda, M. Matsuura, K. Hirota, Y. Tokura. Correlation between spin helicity and an electric polarization vector in quantum-spin chain magnet LiCu_2O_2 . // Phys. Rev. Lett. vol. 100, 127201 (2008).
12. F. Schrettle, S. Krohns, P. Lunkenheimer, J. Hemberger, N. Büttgen, H.-A. Krug von Nidda, A. V. Prokofiev, A. Loidl. Switching the ferroelectric polarization in the $S=1/2$ chain cuprate LiCuVO_4 by external magnetic fields. // Phys. Rev. B vol. 77, 144101 (2008).
13. Y. Wang, J. Li, D. Viehland. Magnetoelectrics for magnetic sensor applications: status, challenges and perspectives. // Materials Today vol. 17, 269-275 (2014).
14. N. Ortega, A. Kumar, J. F. Scott, R. S. Katiyar. Multifunctional magnetoelectric materials for device applications. // J. Phys.: Condens. Matter vol. 27, 504002 (2015).
15. F. Matsukura, Y. Tokura, H. Ohno. Control of magnetism by electric

- fields. // Nature Nanotechnology vol. 10 issue. 3, 209-220 (2015).
16. I. Kézsmárki, U. Nagel, S. Bordács, R. S. Fishman, J. H. Lee, H. T. Yi, S-W. Cheong, T. Rõm. Optical diode effect in the room-temperature multiferroic BiFeO₃. // Phys. Rev. Lett. vol. 115, 127203 (2015).
 17. M. Sato, Sh. Takayoshi, T. Oka. Laser-driven multiferroics and ultrafast spin current generation. // Phys. Rev. Lett. vol. 117, 147202 (2016).
 18. D. M. Juraschek, M. Fechner, A. V. Balatsky, N. A. Spaldin. Dynamical multiferroicity. // Phys. Rev. Materials vol. 1, 014401 (2017).
 19. M. Azimi, M. Sekania, S. K. Mishra, L. Chotorlishvili, Z. Toklikishvili, J. Berakdar. Pulse and quench induced dynamical phase transition in a chiral multiferroic spin chain. // Phys. Rev. B vol. 94, 064423 (2016).
 20. M. Brockmann, A. Klümper, V. Ohanyan. Exact description of magnetoelectric effect in the spin-1/2 XXZ chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. // Phys. Rev. B vol. 87, 054407 (2013).
 21. O. Menchyshyn, V. Ohanyan, T. Verkholyak, T. Krokhmal'skii, O. Derzhko. Magnetism-driven ferroelectricity in spin- $\frac{1}{2}$ XY chains. // Phys. Rev. B vol. 92, 184427 (2015).
 22. W.-L. You, G.-H. Liu, P. Horsch, A. M. Oleś. Exact treatment of magnetism-driven ferroelectricity in the one-dimensional compass model. // Phys. Rev. B vol. 90, 094413 (2014).
 23. R. Maurice, A.-M. Pradipto, C. de Graaf, R. Broer. Magnetic interactions in LiCu₂O₂: Single-chain versus double-chain models. // Phys. Rev. B vol. 86, 024411 (2012).
 24. E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis. Two Soluble Models of an Antiferromagnetic Chain. // Ann. Phys. (N.Y.) vol. 16, 407-466 (1961).
 25. O. Derzhko. Jordan-Wigner fermionization for spin- $\frac{1}{2}$ systems in two dimensions: A brief review. // J. Phys. Studies vol. 5 No 1, 49-64 (2001).
-

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; "Referativnyi Zhurnal"; "Dzherelo".

EDITOR IN CHIEF: Ihor Yukhnovskii.

EDITORIAL BOARD: T. Arimitsu, *Tsukuba*; J.-P. Badiali, *Paris*; B. Berche, *Nancy*; T. Bryk (Associate Editor), *Lviv*; J.-M. Caillol, *Orsay*; C. von Ferber, *Coventry*; R. Folk, *Linz*; L.E. Gonzalez, *Valladolid*; D. Henderson, *Provo*; F. Hirata, *Okazaki*; Yu. Holovatch (Associate Editor), *Lviv*; M. Holovko (Associate Editor), *Lviv*; O. Ivankiv (Managing Editor), *Lviv*; Ja. Ilnytskyi (Assistant Editor), *Lviv*; N. Jakse, *Grenoble*; W. Janke, *Leipzig*; J. Jedrzejewski, *Wroclaw*; Yu. Kalyuzhnyi, *Lviv*; R. Kenna, *Coventry*; M. Korynevskii, *Lviv*; Yu. Kozitsky, *Lublin*; M. Kozlovskii, *Lviv*; O. Lavrentovich, *Kent*; M. Lebovka, *Kyiv*; R. Lemanski, *Wroclaw*; R. Levitskii, *Lviv*; V. Loktev, *Kyiv*; E. Lomba, *Madrid*; O. Makhanets, *Chernivtsi*; V. Morozov, *Moscow*; I. Mryglod (Associate Editor), *Lviv*; O. Patsahan (Assistant Editor), *Lviv*; O. Pizio, *Mexico*; N. Plakida, *Dubna*; G. Ruocco, *Rome*; A. Seitsonen, *Zürich*; S. Sharapov, *Kyiv*; Ya. Shchur, *Lviv*; A. Shvaika (Associate Editor), *Lviv*; S. Sokołowski, *Lublin*; I. Stasyuk (Associate Editor), *Lviv*; J. Strečka, *Košice*; S. Thurner, *Vienna*; M. Tokarchuk, *Lviv*; I. Vakarchuk, *Lviv*; V. Vlachy, *Ljubljana*; 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)2761978; Fax: +38(032)2761158
E-mail: cmp@icmp.lviv.ua <http://www.icmp.lviv.ua>