

Міністерство освіти і науки України
Харківський національний університет імені В.Н. Каразіна
Фізичний факультет
Кафедра теоретичної фізики імені академіка І.М. Ліфшиця

«Допущено до захисту»

Оцінка «_____»

Зав. кафедри теоретичної фізики

Голова ЕК _____

імені академіка І.М. Ліфшиця

«___» травня 2025 р.

доц. Рашба Г. І. _____

«_____» травня 2025 р.

Кононенко Семен Євгенович

**Низькотемпературна термодинаміка анізотропної декорованої
спінової драбини**

Кваліфікаційна робота на здобуття
освітнього ступеня «Магістр»
спеціальність 104 – «фізика та
астрономія» освітньо-наукова програма
«фізика»

Науковий керівник:
Доцент кафедри теоретичної фізики
кандидат фіз.-мат. наук
Єзерська О.В.

Харків 2025

Анотація

Кононенко С.Є. Низькотемпературна термодинаміка анізотропної декорованої спінової драбини. – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітнього ступеня “Магістр” за спеціальністю 104 – «фізика та астрономія». – Харків: ХНУ імені В.Н. Каразіна, 2025. – 39 с. – Іл. 16.

В даній роботі проведені дослідження декорованої спінової драбини структурно схожої на циліндр, в якій трицентрові XXZ фрагменти з'єднані ізінгівськими спінами. Отримані точні розв'язки для спектрів елементарних збуджень елементарної комірки. Методом трансфер-матриці отримані формули для основних термодинамічних величин. Проведено чисельне моделювання польових та температурних залежностей намагніченості, магнітної сприйнятливості, теплоємності, середніх значень z-проекцій у вузлах, а також парних кореляційних функцій. Показано, що ця модель з деякими модифікаціями також може демонструвати псевдо-фазові переходи при ненульових температурах.

Ключові слова: спін, спінова драбина, XXZ – ланцюжок, модель Ізінга, енергетичний спектр, термодинамічні характеристики, трансфер-матриця, псевдо-фазовий перехід.

Abstract

Kononenko S.Y. Low temperature thermodynamics of an anisotropic decorated spin ladder with a three-site unit cell. – Manuscript.

Diploma work for Master of science degree, specialty 104 – «physics and astronomy», – Kharkiv: V.N. Karazin Kharkiv National University, 2025. – p. 39, – f. 16.

This work is devoted to investigation of a decorated spin ladder with structure similar to a cylinder, in which three-center XXZ fragments are connected by Ising spins. Exact solutions for the spectra of elementary excitations of the unit cell were obtained. Expressions for the main thermodynamic quantities were obtained using transfer-matrix method. Numerical simulation for field and temperature dependences of magnetization, heat capacity, local averages of z-projections of spins in sites and pair correlation functions. Also was shown that this model with same modifications can demonstrate pseudo-phase transitions at non zero temperatures.

Keywords: spin, spin ladder, XXZ – chain, Ising model, energetic spectra, thermodynamic characteristics, transfer-matrix, pseudo-phase transition.

Зміст

ВСТУП	5
РОЗДІЛ 1 НИЗЬКОРОЗМІРНІ СПІНОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ МАГНЕТИЗМУ	7
1.1 Одновимірна модель Гейзенберга	7
1.2 Ізотропний замкнений ланцюжок. Розв’язок Бете	7
1.3 Квазіодновимірні моделі зі складною елементарною коміркою	8
1.4 Модель Ізінга. Метод трансфер матриці	9
1.5 Псевдо-фазовий перехід.....	10
РОЗДІЛ 2 СПІНОВА ДРАБИНА ТИПУ ЦИЛІНДР І ЇЇ ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ.....	12
2.1 Гамільтоніан системи	12
2.2 Енергетичний спектр системи.....	14
2.3 Розрахунок статистичної суми методом трансфер-матриці.....	15
2.4 Термодинамічні залежності.....	16
2.5 Вплив одновісної анізотропії	19
2.6 Альтернативний метод розрахунку статистичної суми.....	20
РОЗДІЛ 3 СЕРЕДНІ ЗНАЧЕННЯ І КОРЕЛЯЦІЙНІ СВІВВІДНОШЕННЯ ДЛЯ ЕЛЕМЕНТІВ СПІНОВОГО ЦИЛІНДРУ	22
3.1 Метод знаходження локальних середніх значень z-проекцій спінів	22
3.2 Метод знаходження середніх значень	24
3.3 Кореляційні співвідношення	25
3.4 Нульова кореляція в спеціальному полі.....	27
РОЗДІЛ 4 ПСЕВДО-ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД У МОДИФІКОВАНОМУ СПІНОВОМУ ЦИЛІНДРІ	31
4.1 Модифікації спінового циліндра.....	31
4.2 Спрощена модель.....	34
ВИСНОВКИ.....	36
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ.....	37

ВСТУП

Вже кілька десятиліть низьковимірні спінові моделі є об'єктом інтенсивних теоретичних досліджень. Цей інтерес зумовлений тим, що реальні магнітні структури тривимірних кристалів можуть мати магнітне упорядкування схоже на ланцюжки, подвійні ланцюжки, драбини з кількох ланцюжків. В певному діапазоні температур такі структури добре описуються спіновими моделями, які нехтують слабкими взаємодіями між магнітними атомами [1-6]. Наприклад, магнітну структуру, яку називають дельта-ланцюжками, мають сполуки перехідних і рідкоземельних елементів, такі як делафосіти $\text{LaCuO}_{2.5}$, $\text{YCuO}_{2.5}$ [7, 8] і олівіни ZnL_2S_4 ($\text{L} = \text{Er, Tm, Yb}$) [9, 10].

Причиною такого великого інтересу науковців до дослідження різноманітних спінових систем є те, що іноді зустрічаються сполуки структури яких є такими, які на перший погляд здаються нереальними, проте можуть бути описані відомими методами. Саме тому є сенс моделювати структури, які поки що не мають реальних відповідників, бо вони цілком можуть бути знайдені пізніше. Також термодинамічні характеристики отримані внаслідок теоретичного моделювання, можуть виявитися цікавими і дати напрямок у створенні штучних сполук. Розглянута в даній роботі система не має реальних відповідників, хоча і схожа структурно на деякі біметалічні магнетики.

Метою дипломної роботи є дослідження термодинамічних характеристик, середніх значень у вузлах і кореляційних співвідношень для спінової драбини типу циліндр, що складається з XXZ-ланцюжків.

Нами були поставлені такі *завдання дослідження*:

- провести розрахунки точного спектру для декорованої спінової драбини типу циліндр, яка складається з скінченних спінових ланцюжків зі спіном $1/2$ з XXZ взаємодією, зв'язаних у циліндроподібну структуру двома “кільцями” з ізінгівських спінів;
- методом трансфер-матриці розрахувати чисельно статистичну суму, чисельно промоделювати польові та температурні залежності

намагніченості та теплоємності для різних значень параметрів драбини і дослідити вплив цих параметрів;

- розрахувати локальні середні значення z -проекцій спінів для різних спінів у даній системі і знайти парні кореляційні функції між ними і дослідити вплив параметрів системи на них;
- показати, що дана система з певними модифікаціями здатна демонструвати псевдо-фазовий перехід;

Об'єктом дослідження є спінова драбина типу циліндр, що складається з скінченних XXZ ланцюжків, з'єднаних ізінгівськими спінами.

Предметом є енергетичний спектр, термодинамічні характеристики та кореляційні співвідношення декорованої спінової драбини типу циліндр зі змішаною XXZ-ізінгівською взаємодією.

Практична цінність результатів, отриманих у даній роботі, полягає у тому, що знайдені точні розв'язки, можна використати для перевірки наближених методів опису низьковимірних магнетиків зі більш складною елементарною коміркою. Також розроблений оригінальний код для моделювання локальних і інтегральних термодинамічних характеристик.

Достовірність наведених у роботі результатів підтверджується тим, що були використані відомі методи теоретичної фізики, такі як розв'язання одночастинкового рівняння Шредінгера, метод точної діагоналізації гамільтоніану скінченних драбин, метод трансфер-матриці.

РОЗДІЛ 1

НИЗЬКОРОЗМІРНІ СПІНОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ МАГНЕТИЗМУ

1.1 Одновимірна модель Гейзенберга

В 1927 році Гейзенбергом була запропонована спінова модель [11-13], для описання магнітних діелектриків. В цій моделі речовина розглядається система без урахування електронів провідності, лише парні взаємодії між спінами розташованими у вузлах кристалічної решітки. Дану модель описує такий гамільтоніан:

$$\mathbf{H} = -g\mu H \sum_{\vec{n}} S_{\vec{n}}^z - \sum_{\vec{m}, \vec{n}, \vec{m} \neq \vec{n}} J_{\vec{m}, \vec{n}} \vec{S}_{\vec{m}} \vec{S}_{\vec{n}}. \quad (1.1)$$

Тут $\vec{n}$ і $\vec{m}$ – векторні індекси вузлів в кристалічній решітці, $J_{\vec{m}, \vec{n}}$ – константа обмінної взаємодії між спінами, g – фактор спектроскопічного розчеплення, $\vec{S}_{\vec{n}}$ – спіновий оператор, H – зовнішнє магнітне поле направлене вздовж осі z , μ – магнетон Бора.

Перший доданок у гамільтоніані (1.1) відповідає взаємодії кожного окремого спіна з зовнішнім магнітним полем, а другий – попарним взаємодіям між спінами.

Запропонована на початку модель відповідає тривимірній системі і є досить складною, тому точного розв'язку для повного спектра не вдалося знайти дотепер. Відомі розв'язки тільки для станів з одним чи двома магнонами [12]. Цікавою особливістю двомагнонних станів є можливість появи так званих зв'язаних станів.

1.2 Ізотропний замкнений ланцюжок. Розв'язок Бете

В 1931 році Ганс Бете запропонував спрощений варіант моделі Гейзенберга – одновимірний ізотропний замкнений ланцюжок зі спіном $1/2$ [14]. Гамільтоніан цієї моделі мав вигляд:

$$\mathbf{H} = -J \sum_{n=1}^N (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + S_n^z S_{n+1}^z). \quad (1.2)$$

Класифікація всіх стаціонарних станів в моделі (1.2) проводиться згідно з кількістю спінів орієнтованих проти умовного магнітного поля, яке намагається повернути спіни вздовж осі z . Хвильову функцію Бете запропонував шукати у вигляді суми добутку пласких хвиль з усіма можливим перестановками квазіхвильових векторів окремих хвиль. Таким чином вдалося знайти основний антиферромагнітний стан для досліджуваного ланцюжка $J < 0$. В роботі [15] 1966 року було застосовано хвильову функцію Бете для ланцюжка Гейзенберга із одновісною анізотропією:

$$\mathbf{H} = -J \sum_{n=1}^N (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y + \gamma S_n^z S_{n+1}^z). \quad (1.3)$$

Ключовою відмінністю від ізотропної моделі є те, що взаємодія вздовж осі z відрізняється від взаємодій в площині в γ разів, $|\gamma| > 1$ відповідає анізотропії “easy axis” (легка вісь), а $|\gamma| < 1$ відповідає анізотропії “easy plane”. Важливою спільною рисою (1.2) і (1.3) є те, що має місце збереження проєкції на вісь z повного спіну системи. Метод Бете ліг в основу всіх сучасних точних розв’язків задач про стаціонарні стани ланцюжка Гейзенберга [12-17]. Проте нажаль метод Бете не може бути застосований при дослідженні структур з більш складною елементарною коміркою. Для таких моделей доводиться користуватись наближеними методами або шукати деякі спрощення.

1.3 Квазіодновимірні моделі зі складною елементарною коміркою

Окрім простих ланцюжків, лінійних або замкнених в кільце в реальних магнітних системах спостерігаються більш складні спінові структури: так звані альтернантні ланцюжки, тобто ланцюжки з двома різними константами обмінної взаємодії, дельта ланцюжки [18], спінові драбини. Таким моделям присвячені численні статті і огляди. Наприклад, у роботі [3] було проведено вимірювання температурної залежності теплоємності в магнітному полі для

сполуки $(C_5H_9NH_3)_2CuBr_4$, яка має магнітну підрешітку, схожу на драбину, показало наявність двох піків – різкого та розмитого. Також спінові драбини виявляють цікаві особливості в низькотемпературних польових залежностях намагніченості, такі як утворення проміжних плат намагніченості. Подібний ефект описаний наприклад в роботі [19]. Також для певних спінових драбин передбачено наявність трьох максимумів у температурній залежності теплоємності [20].

1.4 Модель Ізінга. Метод трансфер матриці

Модель Ізінга є математичною моделлю, яка використовує принципи статистичної фізики для опису магнітних явищ. Дана модель дозволяє розв'язувати задачі для різних магнітних систем. У 1920 р. Г. Ленц запропонував цю модель, проте вона стала широко відомою лише після того як Ізінг [21] знайшов за її допомогою термодинамічні характеристики для одновимірного випадку, що виявило те, що для одновимірної моделі відсутній фазовий перехід при ненульовій температурі з феромагнітного стану в парамагнітний, в такій моделі відсутній дальній порядок впорядкування. Проте такий фазовий перехід існує для двовимірного і тривимірного випадків. В 1944 р. Онзагер [22] зробив повний аналіз фазового переходу для двовимірної моделі Ізінга зі спіном $1/2$ за відсутності зовнішнього магнітного поля.

В основі моделі Ізінга лежить присвоєння кожному вузлу решітки свого спіна який є числом σ , що робить таке представлення простішим для розгляду у порівнянні з моделлю Гейзенберга, де кожному вузлу притаманний свій спіновий оператор $\vec{S}$. Найбільш загальний гамільтоніан для моделі Ізінга має такий вигляд:

$$H = - \sum_{\vec{n}, \vec{m}} J_{\vec{n}, \vec{m}} \sigma_{\vec{n}} \sigma_{\vec{m}} - \mu H \sum_{\vec{n}} \sigma_{\vec{n}}. \quad (1.4)$$

Тут перший доданок відповідає попарній взаємодії між спінами, а другий взаємодії системи з зовнішнім магнітним полем, $\sigma = \pm 1$.

Системи, що описуються моделлю Ізінга і мають трансляційну симетрію зручно досліджувати, користуючись методом трансфер-матриці. Наприклад, замкнутий в кільце ланцюжок з довжиною N з ізінгівських спінів $s = 1/2$, з таким гамільтоніаном:

$$\mathbf{H} = -J \sum_n^N \sigma_n \sigma_{n+1} \quad (1.5)$$

може бути описаний з використанням трансфер-матриці, всі елементи якої можуть бути отримані з аналізу сегменту лише з двох спінів. Дана трансфер-матриця матиме вигляд:

$$T = \begin{pmatrix} T_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \\ T_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} e^{-\frac{J}{4T}} & e^{\frac{J}{4T}} \\ e^{\frac{J}{4T}} & e^{-\frac{J}{4T}} \end{pmatrix} \quad (1.6)$$

З власних значень λ_i цієї матриці можна записати статистичну суму для цієї системи:

$$Z = \sum_i \lambda_i^N. \quad (1.7)$$

Проте даний метод може застосовуватися не тільки для чисто ізінгівських систем, але і для більш складних структур, що можуть частково описуватися іншими моделями. Наприклад у роботі [23] застосовують метод трансфер-матриці для дослідження системи, що складається з XX ланцюжків з'єднаних ізінгівськими спінами.

1.5 Псевдо-фазовий перехід

Псевдо-фазовий перехід є особливістю температурних термодинамічних залежностей для деяких спінових систем. Його наявність можна помітити розглядаючи температурну залежність теплоємності: для деякого значення температури буде спостерігатися високий вузький пік, що для звичайних систем відповідає фазовому переходу, проте без самого фазового переходу. Саме на наявності ознаки переходу без самого переходу і ґрунтується назва цього ефекту – псевдо-фазовий перехід.

Дослідження цього ефекту для спінової драбини типу “diamond chain” було проведено в роботі [24]. В ній було отримано точні розв’язки для Гейзенберг-Ізінгівської драбини зі спіном $1/2$. Було отримано фазову діаграму для основного стану і знайдено п’ять типів основного стану: феромагнітний, антиферомагнітний, супер-феромагнітний, а також два сильно вироджені основні стани. Також в цій роботі були розраховані ентропія і теплоємність, для температурної залежності теплоємності спостерігався тонкий високий пік для певної температури.

У роботі [25] було знайдено існування такого ефекту для системи, що складалася з XXZ ланцюжків, з’єднаних між собою ізінгівськими спінами. Для цієї моделі псевдо-фазовий перехід спостерігався лише для певного значення магнітного поля. Проте для деяких систем можна спостерігати даний ефект і без наявності зовнішнього магнітного поля, наприклад для моделі, описаній в роботі [26], тут це драбина взаємодії в якій описуються моделлю Ізінга, умови необхідні для спостереження псевдо-фазового переходу досягаються лише за рахунок правильно підібраних констант взаємодії.

РОЗДІЛ 2

СПІНОВА ДРАБИНА ТИПУ ЦИЛІНДР І ЇЇ ТЕРМОДИНАМІЧНІ ВЛАСТИВОСТІ

2.1 Гамільтоніан системи

В даній роботі розглядається спінова система, що складається з XXZ ланцюжків, які з'єднані у структуру схожу на циліндр ізінгівськими ZZ -спінами див.(рис.2.1). Дана система має трансляційну симетрію. Елементарна комірка складається із 5 вузлів.

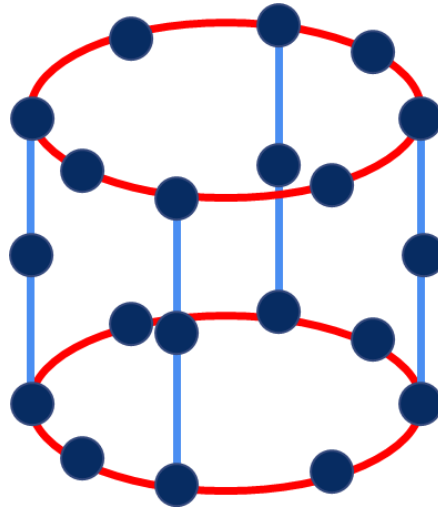


Рисунок 2.1. Схематичне зображення спінового циліндра.

Враховуючи симетрію системи, можна записати гамільтоніан у такому вигляді.

$$\hat{H} = - \sum_{l=1}^L \left[g_1 \mu_B H \sigma_{l,1}^z + g_3 \mu_B H \sigma_{l,3}^z + J_1 (\sigma_{l,1}^z + \sigma_{l+1,1}^z) S_{l,1}^z + J_3 (\sigma_{l,3}^z + \sigma_{l+1,3}^z) S_{l,3}^z + \right. \\ \left. + \sum_{n=1}^3 g \mu_B H S_{l,n}^z + J \sum_{n=1}^2 (S_{l,n}^x S_{l,n+1}^x + S_{l,n}^y S_{l,n+1}^y + \gamma S_{l,n}^z S_{l,n+1}^z) \right] \quad (2.1)$$

З граничними умовами: $\sigma_{L+1,1} = \sigma_{1,1}$, $\sigma_{L+1,3} = \sigma_{1,3}$. Це періодичні граничні умови, які забезпечують періодичність та наявність трансляційної симетрії.

Тут μ_B – магнетон Бора, J_1, J_3 – константи ізінгівської взаємодії між спінами, які зв'язують XXZ ланцюжки, J – константи обмінної взаємодії між спінами в XXZ ланцюжках вздовж осей X і Y , γJ - взаємодія вздовж осі Z ,

g_1 , g_3 та g – g -фактори кілець ізінгівських спінів та XXZ ланцюжків та відповідно, H – стале магнітне поле, яке направлено уздовж осі z .

Для дослідження енергетичного спектру та термодинаміки будемо використовувати метод трансфер-матриці (див., наприклад, [23]). Спочатку треба розбити повний гамільтоніан (2.1) на однакові фрагменти, що повторюються, та знайти всі рівні енергії окремого фрагмента.

Виходячи з геометрії системи, зручно розглядати окремі XXZ ланцюжки з ізінгівськими декораціями зображені на рис.2.2.

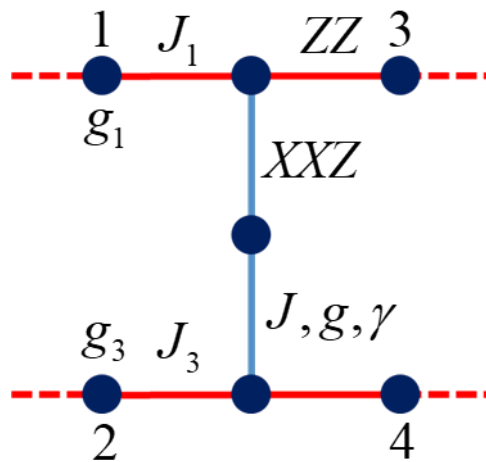


Рисунок 2.2. Елементарна ланка спінового циліндру.

Таким чином можна представити наш гамільтоніан в такому вигляді:

$$\hat{H} = \sum_{l=1}^L \hat{H}(\sigma_{l,1}, \sigma_{l+1,1}, \sigma_{l,3}, \sigma_{l+1,3})$$

Для даного гамільтоніана є справедливими такі комутаційні співвідношення.

$$[\hat{H}, \sigma_{l,m}^z] = 0, \quad m=1,3; \quad l=1,2,3,\dots,L$$

Тому можна замінити оператори проекцій ізінгівських спінів на їх власні значення. Після цієї заміни гамільтоніан для окремої ланки зображеної на рис.2.2 прийме наступний вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{H}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) = & -g\mu_B H \sum_{i=1}^3 S_{i,n}^z - \frac{1}{2} [g_1\mu_B H(\sigma_1 + \sigma_3) + g_3\mu_B H(\sigma_2 + \sigma_4)] - \\ & -J_1(\sigma_1 + \sigma_3)S_{1,n}^z - J_3(\sigma_2 + \sigma_4)S_{3,n}^z - \\ & -J(S_{1,n}^x S_{2,n}^x + S_{1,n}^y S_{2,n}^y + \gamma S_{1,n}^z S_{2,n}^z + S_{2,n}^x S_{3,n}^x + S_{2,n}^y S_{3,n}^y + \gamma S_{2,n}^z S_{3,n}^z). \end{aligned} \quad (2.2)$$

Для подальшого розгляду перепишемо гамільтоніан (2.2) в позначеннях сходинок операторів – $S^{\pm} = S^x \pm iS^y$.

$$\begin{aligned} \hat{H} = E_0 &+ \left(g\mu_B H + J_1(\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{\gamma J}{2} \right) S_{1,n}^- S_{1,n}^+ + \\ &+ \left(g\mu_B H + J_2(\sigma_2 + \sigma_4) + \frac{\gamma J}{2} \right) S_{3,n}^- S_{3,n}^+ + (g\mu_B H + \gamma J) S_{2,n}^- S_{2,n}^+ - \\ &- \frac{J}{2} (S_{1,n}^- S_{2,n}^+ + S_{2,n}^- S_{3,n}^+ + S_{1,n}^+ S_{2,n}^- + S_{2,n}^+ S_{3,n}^-) - \gamma J (S_{1,n}^- S_{1,n}^+ + S_{3,n}^- S_{3,n}^+) S_{2,n}^- S_{2,n}^+ \end{aligned} \quad (2.3)$$

В даному гамільтоніані можна виділити частину, що не залежить від сходинок операторів. Вона відповідає рівню енергії від якого буде вестись відлік.

$$E_0 = -\frac{1}{2} [3g\mu_B H + \gamma J + (g_1\mu_B H + J_1)(\sigma_1 + \sigma_3) + (g_3\mu_B H + J_3)(\sigma_2 + \sigma_4)] \quad (2.4)$$

2.2 Енергетичний спектр системи

Для знаходження енергій, що відповідають різним станам системи розглянемо стани з одним, двома і трьома перевернутими спінами і отримаємо рівняння для їх енергій. Для цього розглянемо рівняння такого типу:

$$\mathbf{H}|m\rangle = (E_0 + \varepsilon_m)|m\rangle, \quad m=1,2,3. \quad (2.5)$$

Де m це кількість перевернутих спінів для даного стану, E_0 розглядається як енергія стану з нулем перевернутих спінів. Ці стани будемо представляти в такому вигляді:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= (A_1 S_1^- + A_2 S_2^- + A_3 S_3^-)|0\rangle; \\ |2\rangle &= (B_1 S_1^- S_2^- + B_2 S_1^- S_3^- + B_3 S_2^- S_3^-)|0\rangle; \\ |3\rangle &= S_1^- S_2^- S_3^-|0\rangle. \end{aligned} \quad (2.6)$$

Підставляючи ці вирази для станів у рівняння (2.5), отримуємо системи рівнянь для введених констант. Щоб дані рівняння мали нетривіальні розв'язки, необхідно щоб визначник системи дорівнював нулю. Таким чином отримуємо рівняння для енергій:

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_1 - h_1 & \frac{J}{2} & 0 \\ \frac{J}{2} & \varepsilon_1 - h_2 & \frac{J}{2} \\ 0 & \frac{J}{2} & \varepsilon_1 - h_3 \end{vmatrix} = 0 \quad (2.7)$$

для стану з одним перевернутим спіном і

$$\begin{vmatrix} \varepsilon_2 - h_1 - h_2 + \gamma J & \frac{J}{2} & 0 \\ \frac{J}{2} & \varepsilon_2 - h_1 - h_3 & \frac{J}{2} \\ 0 & \frac{J}{2} & \varepsilon_2 - h_3 - h_2 + \gamma J \end{vmatrix} = 0 \quad (2.8)$$

для стану з двома перевернутими спінами, стану з трьома перевернутими спінами в свою чергу буде відповідати рівняння

$$\varepsilon_3 = h_1 + h_2 + h_3 - 2\gamma J \quad (2.9)$$

В даних рівняннях використовуються такі позначення для скорочення:

$$h_1 = g\mu_B H + J_1(\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{\gamma J}{2}$$

$$h_2 = g\mu_B H + \gamma J$$

$$h_3 = g\mu_B H + J_3(\sigma_2 + \sigma_4) + \frac{\gamma J}{2}$$

Розв'язавши ці рівняння для всіх комбінацій значень $\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4$, можна отримати повний енергетичний спектр для однієї ланки спінового циліндру. Як результат ми отримаємо для кожної фіксованої комбінації вісім енергій $E_0, \varepsilon_{1,1}, \varepsilon_{1,2}, \varepsilon_{1,3}, \varepsilon_{2,1}, \varepsilon_{2,2}, \varepsilon_{2,3}$ і ε_3 .

2.3 Розрахунок статистичної суми методом трансфер-матриці

Знайшовши енергетичний спектр системи і користуючись наявністю трансляційної симетрії, ми можемо записати трансфер-матрицю з елементами сформованими таким чином:

$$T_{\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4} = e^{-\frac{E_0}{T}} \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_{1,1}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{1,2}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{1,3}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,1}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,2}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,3}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_3}{T}} \right) \quad (2.10)$$

Оскільки елементарна ланка складається з XXZ ланцюжка і чотирьох ізінгівських спінів зі спіном $\sigma = \frac{1}{2}$, отримана трансфер-матриця матиме розмірність 4 на 4. У (2.11) позначено як саме розташовані елементи, що відповідають різним комбінаціям ізінгівських спінів.

$$T = \begin{pmatrix} T_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \\ T_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{-\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \\ T_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \\ T_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}} & T_{+\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}, +\frac{1}{2}} \end{pmatrix} \quad (2.11)$$

Знайшовши власні значення даної трансфер-матриці, можна записати статистичну суму у такому вигляді:

$$Z = \sum_{i=1}^4 \lambda_i^L, \quad (2.12)$$

де λ_i – власні значення трансфер-матриці, а L – кількість ланок в циліндрі. Відповідно можна записати вільну енергію для циліндра, що складається з скінченного числа ланок і з нескінченного:

$$F = -T \ln Z, \quad F_{\inf} = -T \ln \lambda_{\max}.$$

$\lambda_{\max}$ – найбільше з чотирьох власних значень. Визначивши вільну енергію для випадку скінченного і нескінченного циліндрів, можна переходити до вивчення термодинамічних властивостей даної системи.

2.4 Термодинамічні залежності

Для дослідження термодинамічних залежностей для даної системи, ми здійснили математичне моделювання у програмі Wolfram Mathematica. Розглядаючи всі можливі комбінації значень проекцій ізінгівських спінів на одній ланці, була отримана трансфер-матриця за принципом описаним раніше.

Кожен її елемент є функцією від зовнішнього магнітного поля і температури, відповідно такими функціями є також власні значення, статистична сума і вільна енергія. Ці функції мають досить складну структуру, тому для знаходження термодинамічних показників використовується метод чисельного знаходження похідних.

Нас цікавить низькотемпературна поведінка термодинамічних величин. Температура вважається низькою якщо вона мала відносно констант обмінної взаємодії.

Для початку ми розглянули польову залежність намагніченості для спінових циліндрів з різною кількістю ланок. Для розрахунку намагніченості була використана відома формула:

$$M = -\frac{\partial F}{\partial H};$$

Результат даного моделювання можна побачити на рис.2.3. Залежність містить декілька плат проміжного намагнічування, що властиво для низькотемпературних польових залежностей подібних низьковимірних спінових систем. Проте така кількість цих плат зумовлена саме обраними параметрами, а точніше співвідношенням g-факторів спінів, що знаходяться на XXZ ланцюжках, і ізінгівських спінів. Щодо зміни характеру кривих на графіку в залежності від кількості ланок в системі, можна помітити що зі збільшенням цього параметру переходи між проміжними платами намагніченості стають більш різкими. Для системи, що складається всього з 10 атомів (двох ланок) досить важко розрізнити плата намагніченості і здається, що воно всього одне, вже для системи з десятих ланок чітко видно два проміжних плата намагніченості, переходячи до кривої, що відповідає системі з 50 ланок починає бути помітним ще одне невелике плато між першим і другим, для циліндра з п'ятисот ланок вже чітко видно всі три проміжні плата намагніченості.

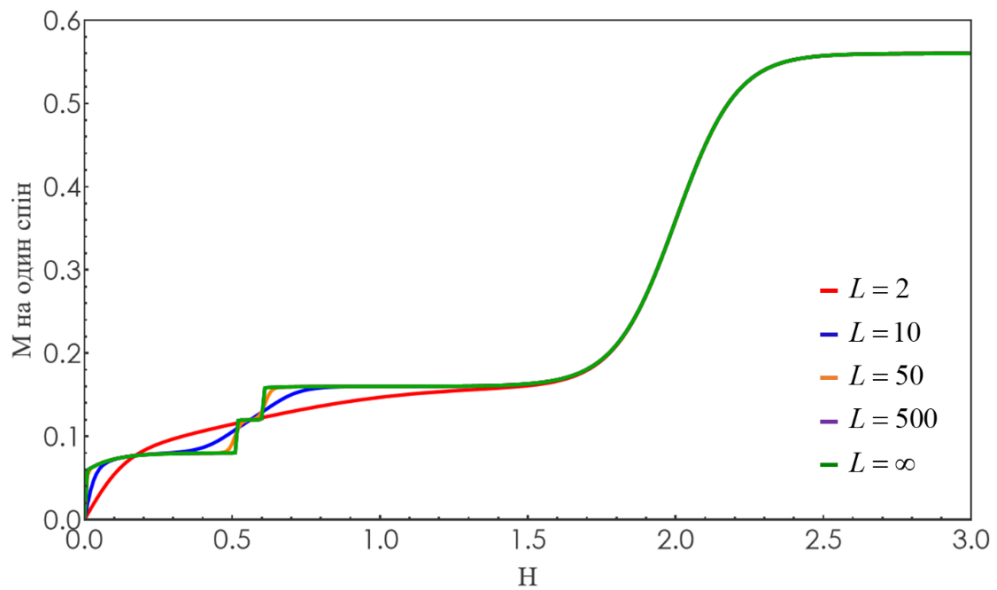


Рисунок 2.3. Залежність намагніченості на один спін від зовнішнього магнітного поля H для циліндрів з різною кількістю ланок L і такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 1.2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $T = 0.1$, $\gamma = 0$.

Також було поведено чисельне моделювання температурної залежності теплоємності на один спін за формулою

$$C = -\frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right) \right).$$

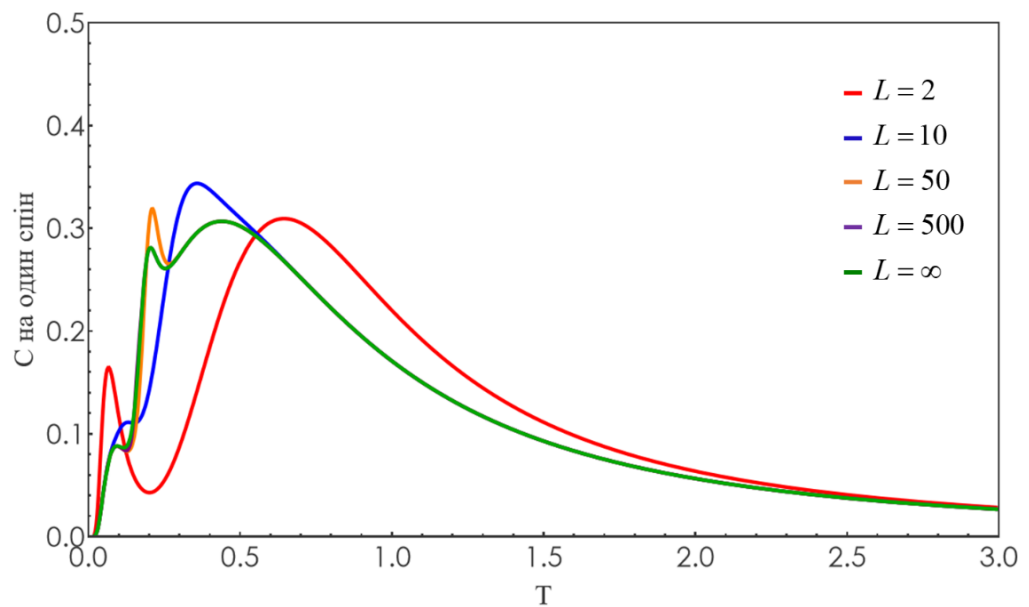


Рисунок 2.4. Залежність теплоємності на один спін від температури T для циліндрів з різною кількістю ланок L і такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 1.2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $H = 0$, $\gamma = 0$.

На рис. 2.4 зображені результати моделювання. З даного графіка видно, що зміна кількості ланок в циліндрі досить сильно впливає на характер цієї залежності.

Далі було проведено дослідження як зовнішнє магнітне поле впливає на температурну залежність теплоємності у розрахунку на один спін.

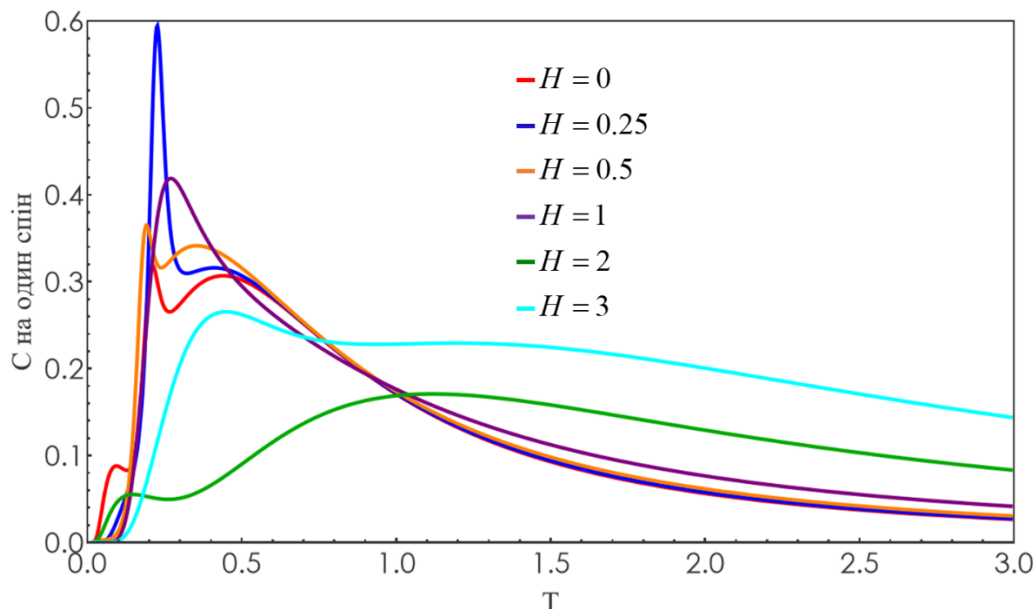


Рисунок 2.5. Залежність теплоємності на один спін від температури T при різних значеннях магнітного поля H для циліндра з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 1.2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $L = 50$, $\gamma = 0$.

Як видно з рис.2.5 досить невеликої зміни поля достатньо, щоб сильно змінити характер даної залежності. Фактично кожна крива відповідає різним станам, в які переходить спінова система під дією магнітного поля. Наприклад в нульовому полі крива має три максимуми проте зі збільшенням поля і впорядкуванням системи кількість максимумів зменшується.

2.5 Вплив одновісної анізотропії

В цій роботі на відміну від попередньої [27] розглядаються не XX , а XXZ ланцюжки, проте в попередньому розділі розглядалась система з коефіцієнтом $\gamma = 0$, що фактично відповідає циліндру з XX ланцюжків. Тому цікавим є те, як анізотропія впливає на термодинамічні залежності. Було проведено

моделювання залежності намагніченості від зовнішнього магнітного поля для циліндрів з різними коефіцієнтами взаємодії γ у XXZ ланцюжках.

На рис. 2.6 зображено результати моделювання.

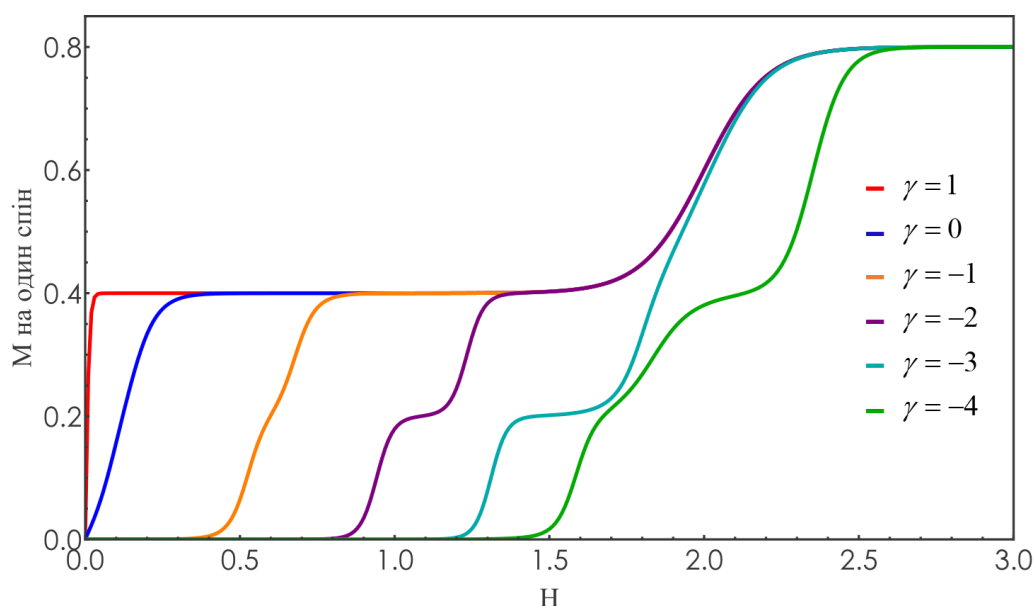


Рисунок 2.6. Залежність намагніченості на один спин від зовнішнього магнітного поля H для циліндрів з різними коефіцієнтами взаємодії γ у XXZ ланцюжках і такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $T = 0.1$, $L = 4$.

З даного графіку видно, що для додатних значень коефіцієнта γ , що відповідає феромагнітній взаємодії, ми можемо спостерігати більш швидкий вихід на проміжне плато намагніченості. Проте для γ менше нуля, що відповідає антиферомагнітній взаємодії, ми спостерігаємо, що при зменшенні цього коефіцієнта поле необхідне для виходу на проміжне плато намагніченості стає дедалі більшим і в деякий момент з'являється друге плато, а при подальшому зменшенні цього параметру система довго знаходиться в стані з нульовою намагніченістю, а проміжні плато намагніченості розмиваються.

2.6 Альтернативний метод розрахунку статистичної суми

Метод трансфер-матриці дає можливість досліджувати системи з будь-якою кількістю ланок, проте дуже важливою є наявність трансляційної

симетрії і однаковість ланок. Якщо ці умови не виконані, то все ще можна застосовувати даний метод, проте доведеться будувати різні матриці для кожного різновиду ланок. Вони будуть діагоналізуватися у різних базисах, це – означає, що доведеться перемножувати недіагональні матриці для всіх ланок. Це значно ускладнить розрахунок статистичної суми.

Тому можна застосувати інший метод побудови статистичної суми, який не є чутливим до відсутності трансляційної симетрії, проте є застосовним лише для систем з невеликою кількістю спінів. Для побудови статистичної суми потрібно буде сформувати масив з усіх можливих комбінацій значень ізінгівських спінів у всій системі, наприклад якщо ми маємо циліндр з трьох ланок, то буде 64 можливі комбінації. Для кожної ланки, для кожної комбінації будуть розраховані вісім енергій способом описаним в розділі 2.2. Отримавши цей масив енергій, можна буде сформувати статистичну суму таким чином:

$$Z = \sum_1^{4^L} \prod_1^L e^{-\frac{E_0}{T}} \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_{1,1}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{1,2}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{1,3}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,1}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,2}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,3}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_3}{T}} \right). \quad (2.13)$$

Нагадаємо, що в формулі (2.13) L – це кількість ланок в циліндрі.

РОЗДІЛ 3

СЕРЕДНІ ЗНАЧЕННЯ І КОРЕЛЯЦІЙНІ СПІВВІДНОШЕННЯ ДЛЯ ЕЛЕМЕНТІВ СПІНОВОГО ЦИЛІНДРУ

3.1 Метод знаходження локальних середніх значень z-проекцій спінів

В даній роботі також розглядаються середні значення Z-проекцій окремих спінів і кореляційні співвідношення між різними типами спінів у системі. Для знаходження середніх значень використовується метод ідейно схожий на той, що був описаний у пункті 2.6 в попередньому розділі. Тобто середні значення будуть розраховані за формулою, що являє собою видозмінену статистичну суму поділену на звичайну статистичну суму. Для середніх значень ізінгівських спінів використовується така формула:

$$\langle \sigma \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^{4^L} \prod_1^L e^{-\frac{E_0}{T}} \left(1 + e^{-\frac{\varepsilon_{1,1}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{1,2}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{1,3}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,1}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,2}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_{2,3}}{T}} + e^{-\frac{\varepsilon_3}{T}} \right) \sigma. \quad (3.1)$$

Тут σ – це значення досліджуваного ізінгівського спіна в усіх розглянутих комбінаціях, тобто існує 4^L таких значень. Результуюча формула дозволяє представити середнє значення будь-якого з ізінгівських спінів в системі як функцію поля і температури і відповідно дослідити залежності від них. Розрахунок для гейзенбергівських спінів, що знаходяться на XXZ ланцюжках є дещо складнішим, оскільки вони на відміну від ізінгівських спінів можуть приймати будь-які значення. Це пов'язано з тим, що $S_{i,n}^z$ не є квантовими числами, тому треба виконати термодинамічне усереднення для знаходження їхніх середніх, а потім вже сумувати по всім комбінаціям. Для них формула для середнього значення прийме такий вигляд:

$$\langle S_{i,j} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^{4^L} \left(\prod_1^{L-1} \left(\sum_1^8 e^{-\frac{\varepsilon}{T}} \right) \langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle \right) \quad (3.2)$$

В цьому виразі також відбувається сумування по всім комбінаціям ізінгівських спінів, проте в добутку де враховуються внески різних ланок один з елементів замінений на $\langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle$ – множник який враховує внесок

ланки на якій розташовано спіни, для якого розраховується середнє значення, i – номер ланки, де знаходиться спіни, j – номер спіна у ланці. Для розрахунку необхідно знайти всі 4^L такі множники для кожної комбінації ізінгівських спінів. Структурно вони матимуть вигляд:

$$\begin{aligned} \langle S_{1,1}^z(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle = & \left[e^{-\frac{E_0(\sigma)}{T}} \underbrace{\langle 0 | S_{1,1}^z | 0 \rangle}_{1/2} + \sum_{i=1}^3 e^{-\frac{E_0(\sigma) + \varepsilon_i^{(1)}(\sigma)}{T}} \langle 1_i | S_{1,1}^z | 1_i \rangle + \right. \\ & \left. + \sum_{i=1}^3 e^{-\frac{E_0(\sigma) + \varepsilon_i^{(2)}(\sigma)}{T}} \langle 2_i | S_{1,1}^z | 2_i \rangle + e^{-\frac{E_0(\sigma) + \varepsilon^{(3)}(\sigma)}{T}} \underbrace{\langle 3 | S_{1,1}^z | 3 \rangle}_{-1/2} \right]. \end{aligned} \quad (3.3)$$

В даній системі існує вісім станів: один з нулем перевернутих спінів, який ми використовуємо для відліку енергії він має енергію $E(\sigma)$, три з одним перевернутим спіном, три – з двома і один стан, де перевернуті проти поля всі три спіни. Енергії для них були розраховані у пункті 2.2. Тут множники виду $\langle m | S_{1,1}^z | m \rangle$ є середніми значеннями проекцій спіна в ланцюжку, що перебуває у відповідному стаціонарному стані $|m\rangle$.

У нульовому стані середнє значення матиме такий вигляд:

$$\langle 0 | S_{1,1}^z | 0 \rangle = \langle 0 | \left(\frac{1}{2} - S_{1,1}^- S_{1,1}^+ \right) | 0 \rangle = \frac{1}{2} - \langle 0 | S_{1,1}^- S_{1,1}^+ | 0 \rangle = \frac{1}{2}. \quad (3.4)$$

Для стану $|1_i\rangle$:

$$\langle 1_i | S_{1,1}^z | 1_i \rangle = \frac{1}{2} - |A_{1,1}^i|^2 \quad (3.5)$$

Коефіцієнти $A_{1,1}^i$ можна знайти як власні вектори для такої матриці:

$$\begin{pmatrix} h_1 & -\frac{J}{2} & 0 \\ -\frac{J}{2} & h_2 & -\frac{J}{2} \\ 0 & -\frac{J}{2} & h_3 \end{pmatrix}, \quad (3.6)$$

яка впливає з рівняння (2.5).

Середнє $\langle 2_i | S_{1,1}^z | 2_i \rangle$ може бути виражене в такому вигляді:

$$\langle 2_i | S_{1,1}^z | 2_i \rangle = \frac{1}{2} - \left(|B_{1,1}^i|^2 + |B_{1,2}^i|^2 \right) \quad (3.7)$$

Коефіцієнти B^i визначаються як власні вектори для матриці:

$$\begin{pmatrix} -h_1 - h_2 + \gamma J & \frac{J}{2} & 0 \\ \frac{J}{2} & -h_1 - h_3 & \frac{J}{2} \\ 0 & \frac{J}{2} & -h_3 - h_2 + \gamma J \end{pmatrix} \quad (3.8)$$

Середнє значення для стану з трьома перевернутими спінами:

$$\langle 3_i | S_{1,1}^z | 3_i \rangle = -\frac{1}{2} \quad (3.9)$$

3.2 Метод знаходження середніх значень

Користуючись описаними вище формулами можна дослідити польову залежність середніх значень проекцій різних типів спінів в даній системі.

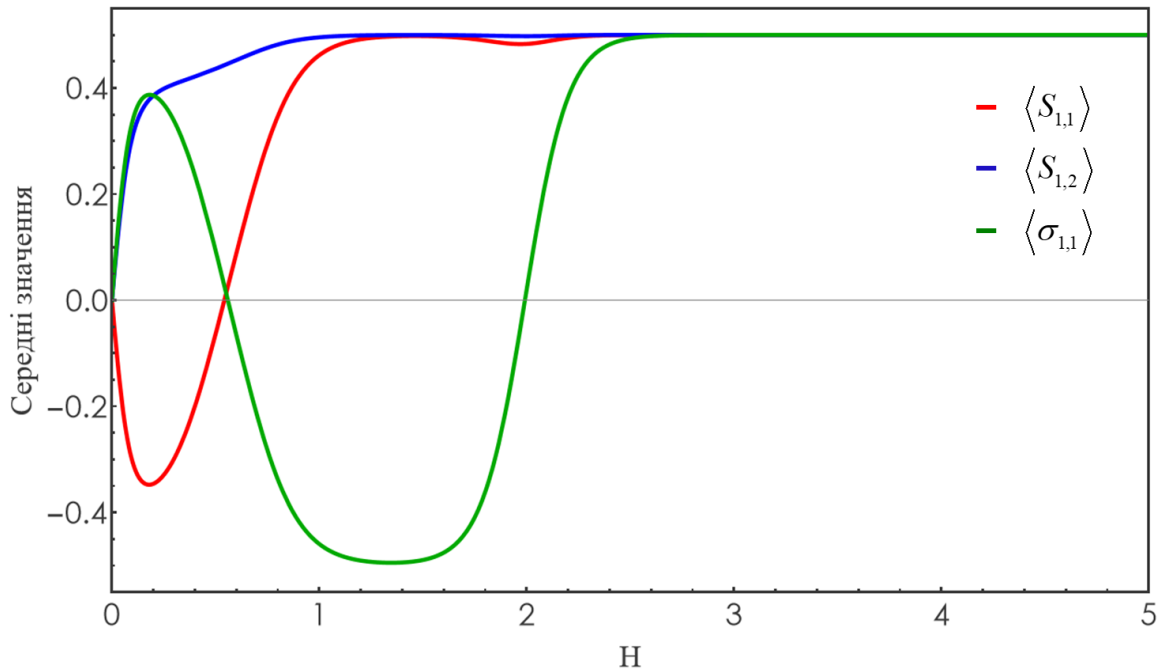


Рисунок 3.1. Залежність середніх значень різних спінів в системі від магнітного поля H для циліндра з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 1.2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $T = 0.1$, $L = 2$.

На рис.3.1. зображені середні значення ізінгівських спінів, а також середні значення першого і другого спіна в XXZ ланцюжку і можна

спостерігати які саме спіни перевертаються під дією зовнішнього магнітного поля.

Через симетрію у структурі ланок, середнє значення проекції розраховане для одного ізінгівського спіна буде справедливим і для трьох інших, те саме стосується і першого спіна в XXZ ланцюжку – його середнє співпадає з середнім для третього спіна в ланцюжку. Лише середнє значення проекції для другого спіна в ланцюжку є унікальним в межах однієї ланки.

3.3 Кореляційні співвідношення

Для розрахунку кореляційних співвідношень можна використовувати формули схожі на ті, що були описані в пункті 3.1. Для знаходження кореляції між двома ізінгівськими спінами використовується така формула:

$$\langle \sigma_i \sigma_j \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^{4^L} \left(\prod_1^{L-1} \left(\sum_1^8 e^{\frac{\varepsilon}{T}} \right) \sigma_i \sigma_j \right), \quad (3.10)$$

де σ_i і σ_j – ізінгівські спіни для яких розраховується кореляція. Для знаходження кореляції між ізінгівськими спінами і одним зі спінів, що знаходиться на ланцюжку можна записати таку формулу:

$$\langle S_{i,j} \sigma_k \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^{4^L} \left(\prod_1^{L-1} \left(\sum_1^8 e^{\frac{\varepsilon}{T}} \right) \langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle \sigma_k \right) \quad (3.11)$$

Середні значення $\langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle$ знаходяться методом описаним в пункті 3.1. Визначення кореляції між двома спінами, що знаходяться на одному ланцюжку може бути здійснено таким методом:

$$\langle S_{i,j} S_{i,m} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^{4^L} \left(\prod_1^{L-1} \left(\sum_1^8 e^{\frac{\varepsilon}{T}} \right) \langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) S_{i,m}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle \right) \quad (3.12)$$

В даному випадку множник $\langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) S_{k,m}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle$ враховує енергетичний внесок ланки, на якій знаходяться спіни, що розглядаються. Він може бути обчислений за формулою:

$$\begin{aligned}
\langle S_1^z(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) S_2^z(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle = & \left[e^{-\frac{E_0(\sigma)}{T}} \underbrace{\langle 0 | S_1^z S_2^z | 0 \rangle}_{1/4} + \right. \\
& + \sum_{i=1}^3 e^{-\frac{E_0(\sigma) + \varepsilon_i^{(1)}(\sigma)}{T}} \langle 1_i | S_1^z S_2^z | 1_i \rangle + \\
& \left. + \sum_{i=1}^3 e^{-\frac{E_0(\sigma) + \varepsilon_i^{(2)}(\sigma)}{T}} \langle 2_i | S_1^z S_2^z | 2_i \rangle + e^{-\frac{E_0(\sigma) + \varepsilon^{(3)}(\sigma)}{T}} \underbrace{\langle 3 | S_1^z S_2^z | 3 \rangle}_{1/4} \right].
\end{aligned} \tag{3.13}$$

В цьому прикладі середні добутків для всіх станів можна обчислити таким чином:

$$\begin{aligned}
\langle 0 | S_1^z S_2^z | 0 \rangle &= \frac{1}{4}; \\
\langle 1_i | S_1^z S_2^z | 1_i \rangle &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \left(|A_1^i|^2 + |A_2^i|^2 \right); \\
\langle 2_i | S_1^z S_2^z | 2_i \rangle &= \frac{1}{4} - \frac{1}{2} \left(|B_2^i|^2 + |B_3^i|^2 \right); \\
\langle 3 | S_1^z S_2^z | 3 \rangle &= \frac{1}{4}.
\end{aligned} \tag{3.14}$$

Коефіцієнти A^i і B^i знаходяться тим самим методом, що і в пункті 3.1.

Якщо ж потрібно розрахувати кореляційне співвідношення для спінів, що знаходяться на різних ланцюжках, то можна використовувати формулу:

$$\langle S_{i,j} S_{k,m} \rangle = \frac{1}{Z} \sum_1^{4^L} \left(\prod_1^{L-2} \left(\sum_1^8 e^{-\frac{\varepsilon}{T}} \right) \langle S_{i,j}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle \langle S_{k,m}(\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \rangle \right) \tag{3.15}$$

Індекси i і k відповідають номеру ланки на якій знаходяться спіни, що розглядаються, а індекси j і m показують їх розташування на цих ланцюжках.

За допомогою описаних методів було проведено моделювання польових залежностей для кореляційних співвідношень між різними парами спінів в системі.

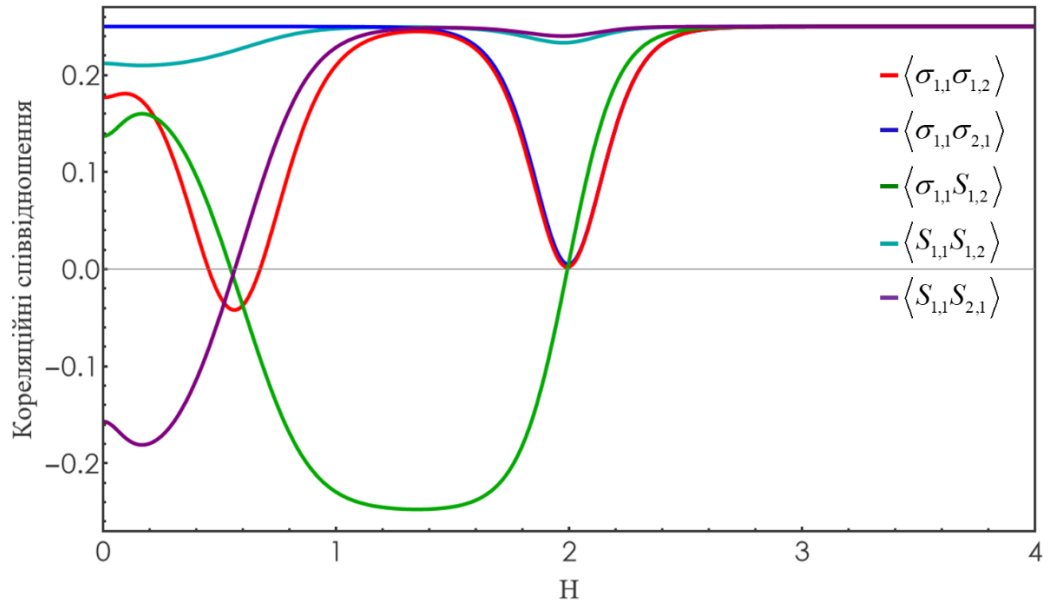


Рисунок 3.2. Залежність кореляційних співвідношень між різними парами спінів від магнітного поля H для циліндра з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 1.2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $T = 0.1$, $L = 4$.

На рис. 3.2 можна побачити, що для абсолютно різних пар спінів кореляційні функції досягають свого максимального значення в сильному магнітному полі. Це відповідає тому, що в сильному полі всі спіни стають орієнтованими по полю. Проте динаміка кореляційних співвідношень у слабших полях є не такою передбачуваною, особливу цікавість представляє занулення кореляції в полі $H = 2$ для пар ізінгівських спінів.

3.4 Нульова кореляція в спеціальному полі

Кореляційне співвідношення між ізінгівськими спінами на одній ланці, яке зверталося в нуль при спеціальному значенні поля, здалося нам цікавим і ми вирішили дослідити його більш детально. Для цього було розглянуто те як буде виглядати його залежність від поля для різних значень g -факторів спінів, що знаходяться на XXZ ланцюжках, при незмінних інших параметрах системи. На рис.3.3 зображено результати цього моделювання.

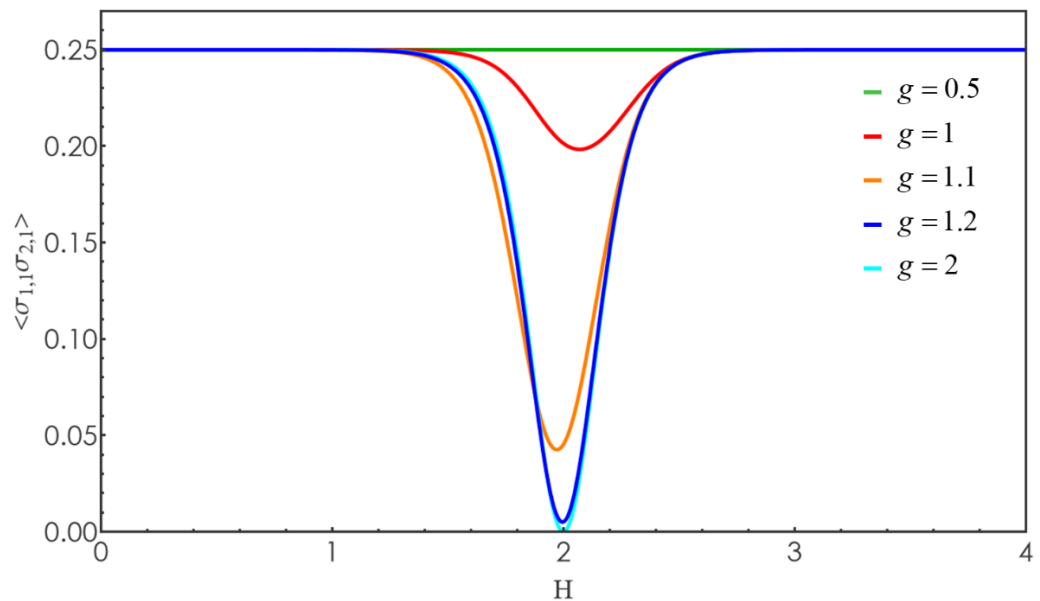


Рисунок 3.3. Залежність кореляційних співвідношень між двома спінами на одному “кільці” від магнітного поля H для циліндра з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $T = 0.1$, $\gamma = 0$, $L = 4$.

На графіку можна побачити, що у випадку коли g -фактор спінів, що знаходяться на ланцюжках помітно менше за g -фактор ізінгівських спінів значення проекцій ізінгівських спінів, що розглядаються є повністю корельованими. Проте зі зростанням значення g -фактора спінів на ланцюжках починає з’являється мінімум поблизу значення поля $H = 2$, і коли g -фактор стає помітно більшим кореляція набуває нульового значення.

Це відбувається тому, що при значеннях g -фактору XXZ ланцюжка більших за значення g -фактору ізінгівських спінів, зі зростанням поля спіни у ланцюжку будуть розвертатися по полю раніше за ізінгівські спіни. Тому починаючи з деякого поля зміна енергії буде залежати лише від ізінгівських спінів. На рис. 3.5 показаний їх внесок в енергію.

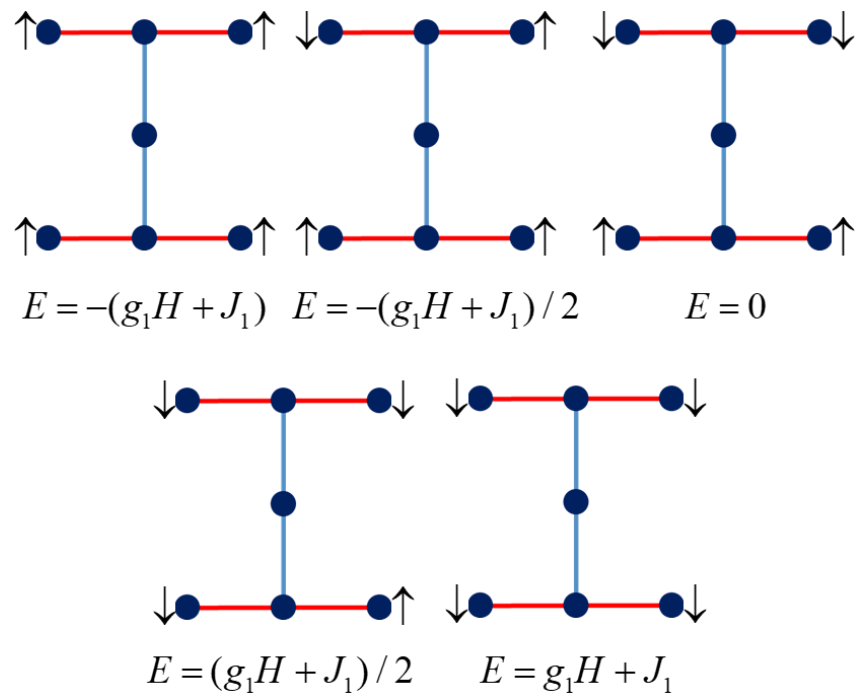


Рисунок 3.5. Типи орієнтацій ізінгівських спінів з різними енергіями.

Можна помітити, що для всіх станів зображених на рис 3.5 значення вкладу енергії буде дорівнювати $E = 0$ при спеціальному значенні поля.

$$H = \frac{-J_1}{g_1} \quad (3.16)$$

При такому значенні поля всі 16 можливих конфігурацій ізінгівських спінів на одній ланці стають еквівалентними з енергетичної точки зору, через що кожен з ізінгівських спінів може приймати будь-яке з можливих значень, яке ніяк не пов'язане зі значеннями інших. Результатом цього і стає нульова кореляція в цьому спеціальному полі за умови, що g -фактори спінів, що знаходяться на ланцюжках, більші за g -фактори ізінгівських спінів.

Також цікавим є вплив температури на даний ефект. Для того щоб дослідити це проведемо моделювання кореляційного співвідношення для двох ізінгівських спінів, що знаходяться на різних “кільцях”.

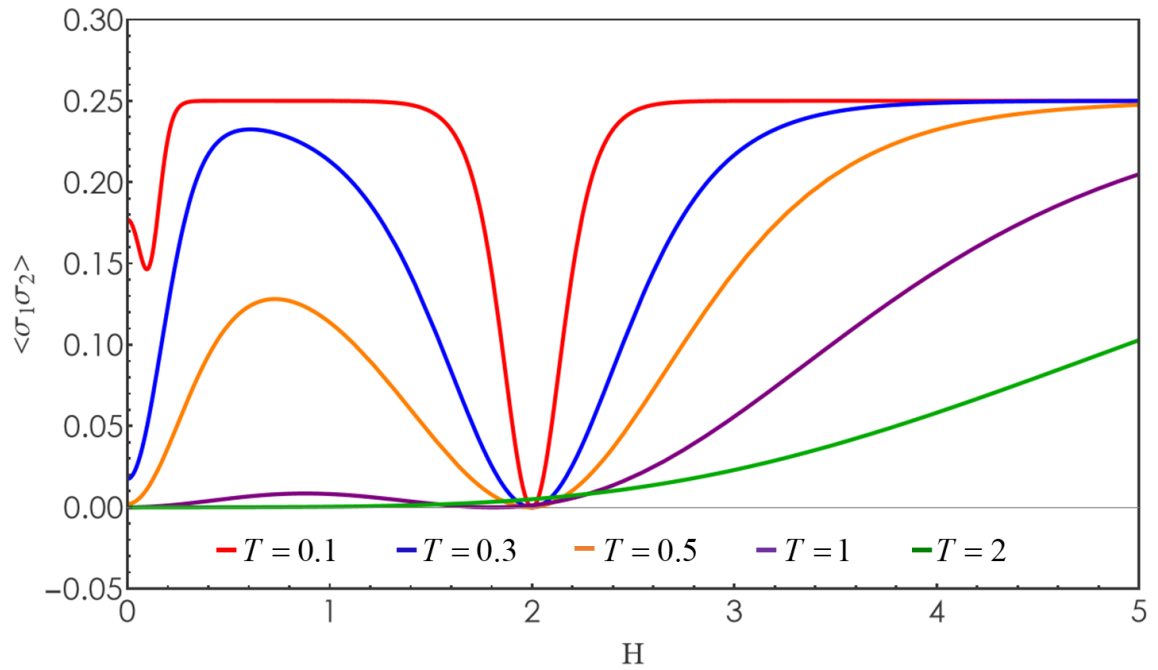


Рисунок 3.5. Залежність кореляційних співвідношень між двома спінами на різних “кільцях” від магнітного поля H для різних температур для циліндра з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 1$, $g = 2$, $J_1 = J_3 = -2$, $J = 1$, $\gamma = 0$, $L = 4$.

З рис. 3.5 видно, що зі зростанням температури кореляція зменшується, проте її нульове значення в спеціальному полі зберігається до досягнення відносно високих температур. Також важливо зазначити, що хоча це значення є близьким до нуля, дійсно, нульова кореляція може бути досягнута лише при температурі, що дорівнює нулю.

РОЗДІЛ 4

ПСЕВДО-ФАЗОВИЙ ПЕРЕХІД У МОДИФІКОВАНОМУ СПІНОВОМУ ЦИЛІНДРІ

4.1 Модифікації спінового циліндра

Спіновий циліндр описаний в пункті 2.1 хоча і є досить цікавою системою проте для нього не спостерігається псевдо-фазовий перехід, який може спостерігатися для деяких спінових систем [24,25]. Тому ми вирішили створити фрустрацію в даній системі за допомогою додаткових взаємодій в ланках, дописавши такий доданок: $-\sum_{l=1}^L \left[J_{21}(\sigma_{l,1}^z + \sigma_{l+1,1}^z) + J_{23}(\sigma_{l,3}^z + \sigma_{l+1,3}^z) \right] S_{l,2}^z$ до початкового гамільтоніану (2.1). Новий гамільтоніан матиме такий вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -\sum_{l=1}^L \left[g_1 \mu_B H \sigma_{l,1}^z + g_3 \mu_B H \sigma_{l,3}^z + J_1(\sigma_{l,1}^z + \sigma_{l+1,1}^z) S_{l,1}^z + \right. \\ & \left. + J_3(\sigma_{l,3}^z + \sigma_{l+1,3}^z) S_{l,3}^z + \left(J_{21}(\sigma_{l,1}^z + \sigma_{l+1,1}^z) + J_{23}(\sigma_{l,3}^z + \sigma_{l+1,3}^z) \right) S_{l,2}^z + \right. \\ & \left. + \sum_{n=1}^3 g \mu_B H S_{l,n}^z + J \sum_{n=1}^2 \left(S_{l,n}^x S_{l,n+1}^x + S_{l,n}^y S_{l,n+1}^y + \gamma S_{l,n}^z S_{l,n+1}^z \right) \right]. \end{aligned} \quad (3.17)$$

Після цієї модифікації елементарна ланка буде виглядати так, як зображено на рис. 4.1, додаткові взаємодії позначені зеленим і фіолетовим кольорами.

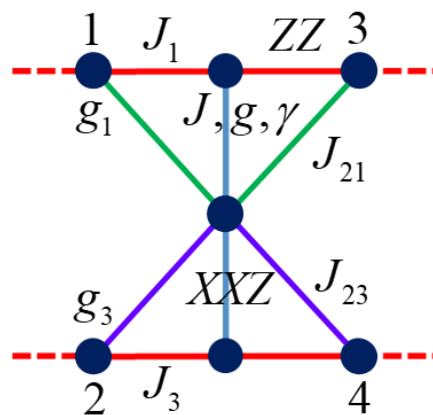


Рисунок 4.1. Елементарна ланка спінового циліндру з додатковими взаємодіями J_{21} і J_{23} .

Дані зміни вплинуть на рівняння для розрахунку енергетичного спектра системи. Рівняння (2.7) і (2.8) матимуть така саму структуру, проте позначення

h_1 , h_2 і h_3 будуть відповідати іншим енергіям (ефективним полям в енергетичних одиницях):

$$\begin{aligned} h_1 &= g\mu_B H + J_1(\sigma_1 + \sigma_3) + \frac{\gamma J}{2}; \\ h_2 &= g\mu_B H + J_{21}(\sigma_1 + \sigma_3) + J_{23}(\sigma_2 + \sigma_4) + \gamma J; \\ h_3 &= g\mu_B H + J_3(\sigma_2 + \sigma_4) + \frac{\gamma J}{2}. \end{aligned} \quad (3.18)$$

З розв'язку цих нових рівнянь можна отримати енергії і записати трансфер-матрицю аналогічну до (2.11), що дозволить розрахувати статистичну суму і змодельовати термодинамічні залежності так само як описано в пункті 2.4.

Для того щоб спостерігати псевдо-фазовий перехід для даної системи, необхідно змодельовати залежність теплоємності від температури, проте він буде спостерігатися не завжди – потрібно підібрати константи взаємодії, а також спеціальне поле, де ефект буде найбільш яскраво виражений.

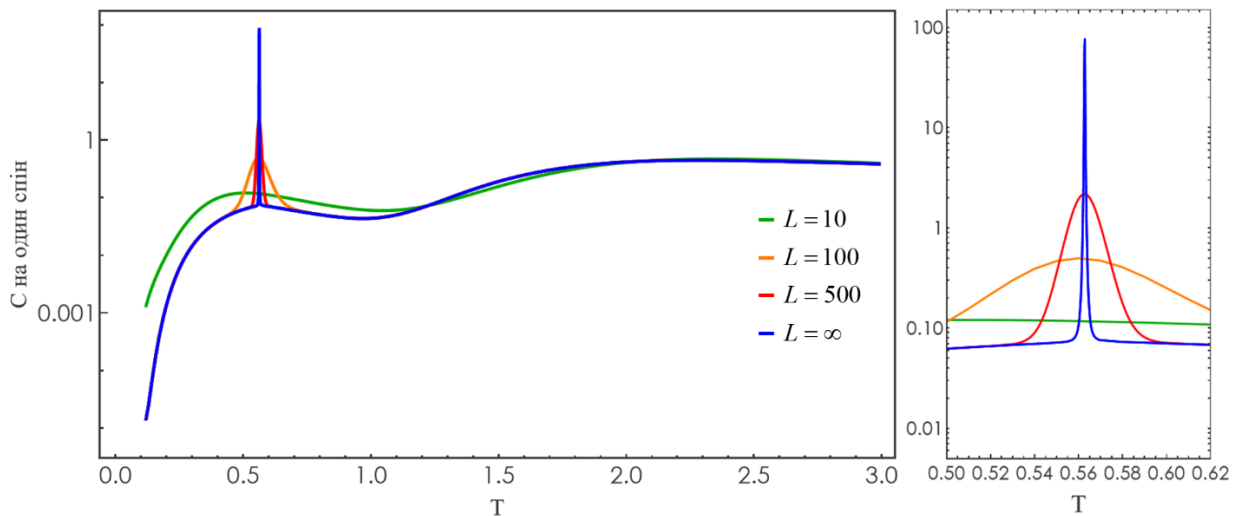


Рисунок 4.2. Залежність теплоємності від температури T для циліндрів з різною кількістю ланок L і такими параметрами: $g_1 = g_3 = 2$, $g = 1$, $J = 1$, $J_1 = J_3 = -12$, $J_{21} = -1$, $J_{23} = 0.5$, $H = 0.4$, $\gamma = -1$.

На рис. 4.2 можна побачити різке зростання теплоємності для деякої температури. Також важливо зазначити, що цей ефект найбільш помітний саме для систем з великою кількістю ланок: для циліндра з нескінченною кількістю

ланок пік є найвищим, а для того, що містить всього 10 ланок цей ефект взагалі не спостерігається.

Для вибору оптимального поля можна розглядати температурні залежності ентропії для даної системи в різних полях. На потрібному проміжку значень зовнішнього магнітного поля буде спостерігатися стрибок ентропії. На рис. 4.3 зображені чисельно змодельовані температурні залежності ентропії в різних полях, можна побачити, що при русі від поля $H = 0.4$ стрибок ентропії зменшується, тому це значення було обране як те, при якому спостерігати псевдо-фазовий перехід буде досить зручно.

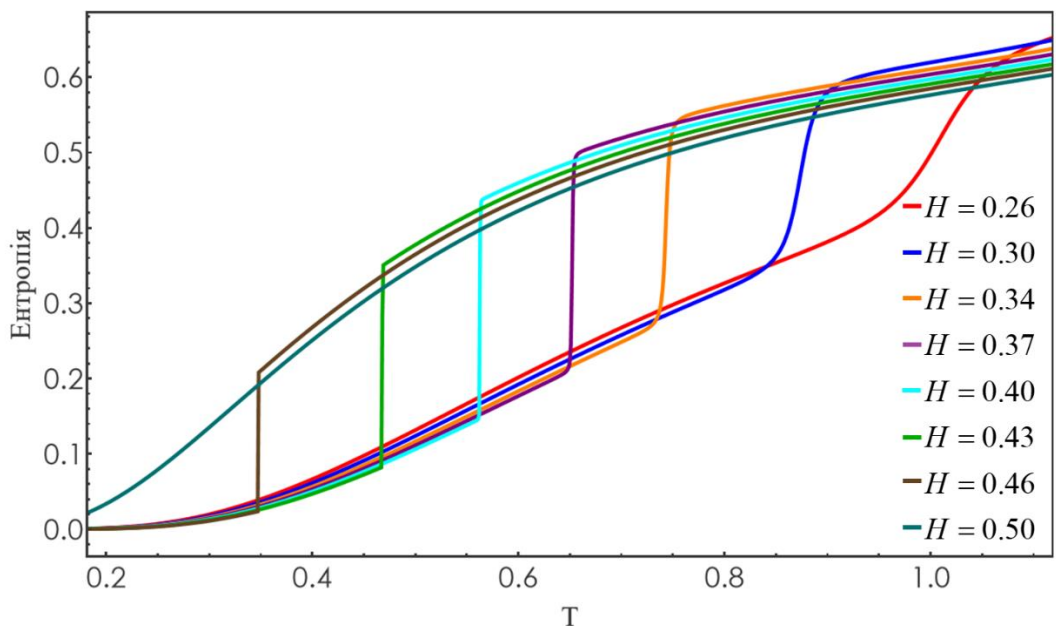


Рисунок 4.3. Залежність ентропії системи від температури T для різних полів для циліндра з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 2$, $g = 1$, $J_1 = J_3 = -12$, $J_{21} = -1$, $J_{23} = 0.5$, $J = 1$, $\gamma = -1$, $L = \infty$.

З опису до рис. 4.3 можна помітити, що параметри системи є досить дивними порівняно з іншими комбінаціями, які вивчалися в даній роботі. В даному випадку система являє собою циліндр, що складається з анізотропних XXZ ланцюжків, при цьому константи обмінної взаємодії між J_1 і J_3 є більшими на порядок від констант взаємодії J_{21} і J_{23} , які в свою чергу мають різні знаки. Проте навіть невеликі зміни в цих параметрах приводять до того, що псевдо-фазовий перехід перестає спостерігатися. Саме тому ми вирішили

розглянути трохи простішу систему, яка є схожою на спіновий циліндр і також здатна демонструвати даний ефект.

4.2 Спрощена модель

Нова модель також буде складатися з XXZ ланцюжків, але кожен два ланцюжки будуть з'єднані лише одним ізінгівським спіном, який буде взаємодіяти з усіма трьома спінами в ланцюжках. Подібна модель, але без додаткових взаємодій, досліджувалася в роботі [25]. Гамільтоніан нової системи має вигляд:

$$\hat{H} = -\sum_{l=1}^L \left[g_1 \mu_B H \sigma_l^z + (\sigma_l^z + \sigma_{l+1}^z) (J_1 S_{l,1}^z + J_2 S_{l,2}^z + J_3 S_{l,3}^z) + \sum_{n=1}^3 g \mu_B H S_{l,n}^z + J \sum_{n=1}^2 (S_{l,n}^x S_{l,n+1}^x + S_{l,n}^y S_{l,n+1}^y + \gamma S_{l,n}^z S_{l,n+1}^z) \right] \quad (3.19)$$

На рис. 4.4 схематично зображено фрагмент системи, що відповідає цьому гамільтоніану.

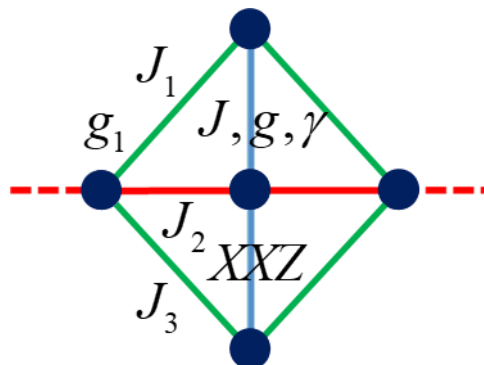


Рисунок 4.4. Елементарна ланка для спрощеної системи

Для знаходження енергетичного спектру системи, необхідного для побудови трансфер-матриці, можна використати рівняння (2.7), (2.8) і (2.9), проте позначення h_1 , h_1 і h_1 , в цьому випадку, будуть відповідати таким ефективним полям в енергетичних одиницях:

$$\begin{aligned} h_1 &= g \mu_B H + J_1 (\sigma_1 + \sigma_2) + \frac{\gamma J}{2}; \\ h_2 &= g \mu_B H + (J_1 + J_2 + J_3) (\sigma_1 + \sigma_2) + \gamma J; \\ h_3 &= g \mu_B H + J_3 (\sigma_1 + \sigma_2) + \frac{\gamma J}{2}. \end{aligned} \quad (3.20)$$

Через те, що з кожним ланцюжком взаємодіють лише два ізінгівські спіни, трансфер-матриця матиме розмірність 2×2 , що значно спрощує розв'язок. З трансфер-матриці можна отримати статистичну суму і почати моделювати термодинамічні залежності. На рис. 4.5 зображено залежність теплоємності на один спін від температури і на ній чітко видно пік, який відповідає псевдо-фазовому переходу.

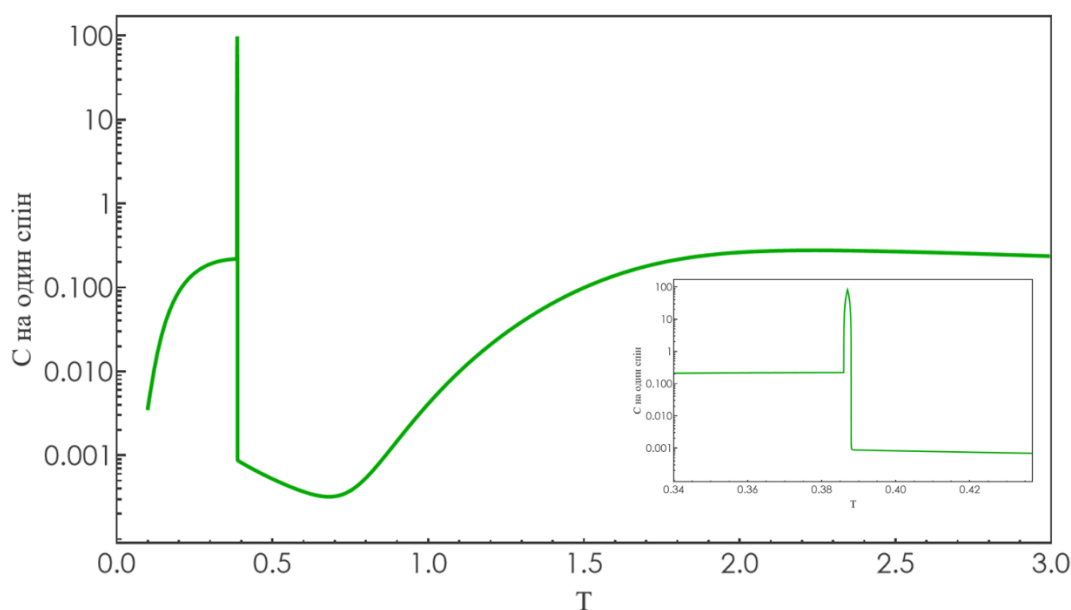


Рисунок 4.5. Залежність теплоємності від температури T для спрощеної системи з такими параметрами: $g_1 = g_3 = 2$, $g = 1$, $J_1 = J_3 = -1$, $J_{21} = -1$, $J_2 = -12$, $J = -1$, $\gamma = 1$, $L = \infty$, $H = 0.5$.

Цікавим в цій системі є те, що даний ефект можна спостерігати для ізотропних ланцюжків і при однакових знаках додаткових взаємодій.

Більш детально дана система розглядається в нашій статті, що прийнята до друку в міжнародному журналі “Фізика низьких температур” і вийде в п’ятдесят першому томі, у номері, що буде опублікований наприкінці 2025 року.

ВИСНОВКИ

В даній роботі було досліджено термодинамічні характеристики, середні значення у вузлах і кореляційні співвідношення для декорованої спінової драбини, яка складається з XXZ ланцюжків зі спіном $1/2$, зв'язаних у циліндроподібну структуру ізінговськими спінами $s=1/2$.

Отримано наступні результати:

- ✓ розраховано точний енергетичний спектр декорованої спінової драбини типу циліндр, на основі цього спектра побудована трансфер-матриця і знайдена статистична сума;
- ✓ проведено чисельне моделювання польових та температурних залежностей намагніченості та теплоємності для різних значень параметрів системи: кількості ланок в циліндрі, відношення між g -факторами спінів на XXZ ланцюжках і декоруючих ізінгівських спінів, показано вплив зовнішнього магнітного поля на температурні залежності для теплоємності;
- ✓ були промодельовані локальні середні значення z -проекцій спінів для різних спінів і парні кореляційні функції між ними, розглянуто і пояснено явище нульової кореляції між ізінгівськими спінами в критичному полі, для систем з певним співвідношенням g -факторів;
- ✓ продемонстрований псевдофазовий для спінового циліндра з додатковими взаємодіями, а також запропонована модель більш зручна для вивчення цього ефекту.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Cabra D.C., Honecker A., Pujol P. Magnetization plateaux in N -leg spin ladders // *Phys Rev B* –1998.– 58, No10. –P.6241-6357.
2. Watson B.C. *et. al.* Magnetic Spin Ladder $C_5H_{12}N_2CuBr_4$: High-Field Magnetization and Scaling near Quantum Criticality // *Phys.Rev.Lett.* – 2001. – V.86, No.22. – P. 5168-5171.
3. Willett R.D., Galeriu C., Landee C.P., Turnbull M.M., and Twamley B. Structure and Magnetism of a Spin Ladder System: $(C_5H_9NH_3)_2CuBr_4$ // *Inorg.Chem.*– 2004.– V.43, No 13. – P. 3804 – 3811.
4. Tandon K, Lai S, Pati S K, Ramasesha S and Sen D Magnetization properties of some quantum spin ladders // *Phys. Rev. B* –1999.– V.59– P. 396-410.
5. Sakai T. Quantum magnetization plateaux of an anisotropic ferrimagnetic spin chain / T. Sakai, K. Okamoto // *Phys.Rev.B* – 2002. – V.65 – 214403-6pgs.
6. Mikeska H.-J. One-Dimensional Magnetism / H.-J. Mikeska and A.K. Kolezhuk // *Lecture Notes in Physics* – 2004. – V. 645 – P.1–83.
7. $LaCuO_{2.5+x}$ and $YCuO_{2.5+x}$ Delafossites: Materials with Triangular $Cu^{2+\delta}$ Planes / R. J. Cava at el. *Journal of Solid State Chemistry*. 1993. T. 104, № 2. C. 437–452.
8. Quantum solitons in the sawtooth lattice / D. Sen et al. *Physical Review B*. 1996. Vol. 53, no. 10. P. 6401–6405.
9. Geometric magnetic frustration in olivines / I. S. Hagemann et al. *Physical Review B*. 2000. Vol. 62, no. 2. P. R771–R774.
10. Magnetic characterization of the sawtooth-lattice olivines ZnL_2S_4 ($L=Er, Tm, Yb$) / G. C. Lau et al. *Physical Review B*. 2006. Vol. 73, no. 1.
11. Heisenberg W. Zur Theorie des Ferromagnetismus // *Z.Physik.*– 1928.–V. 49.– p.619 – 636.
12. Mattis D. *The Theory of Magnetism Made Simple*. World Scientific Publishing, 2006. – 580 p.

13. Sutherland B. Beautiful Models. 70 Years of Exactly Solved Many-Body Problems. – World Scientific Publishing, Singapore, 2004.- 381pp.
14. Bethe, H. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette // Zeitschrift für Physik, 71, 205-226.
15. Yang C.N., Yang C.P. One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System // Phys. Rev.–1966.–V. 150, Iss.1. – P.321-327.
16. A.A. Ovchinnikov, V.O. Chervanovskii, *Dokl. Akad. Nauk SSSR*, 266, 838 (1982).
17. Zvyagin A.A., Finite Size Effects in Correlated Electron Models: Exact Results. – Imperial College Press, London, & World Scientific, Singapore, 2005. – 380pp.
18. Ohanyan. Antiferromagnetic sawtooth chain with Heisenberg and Ising bonds. Condensed Matter Physics. 2009. Vol. 12, no. 3. P. 343–351.
19. Chervanovskii V. O., Ezerskaya E. V., Kononenko S. Y. The energy spectrum and magnetization profile of the decorated spin ladder systems. *Low Temperature Physics*. 2024. Vol. 50, no. 2. P. 152–157.
20. Energy spectrum and thermodynamics of anisotropic spin-1/2 two-leg ladder / V. O. Chervanovskii et al. International Journal of Quantum Chemistry. 2006. Vol. 106, no. 10. P. 2254–2261.
21. Ising E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus // Z.Phys. – 1925. – V.31.– p.253 – 258.
22. Onsager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition // – Phys. Rev. 1944. – V. 65, N 3-4. – P. 117-149.
23. Ezerskaya E., Chervanovskii V. Low Temperature Thermodynamics of Spin-1/2 XX Chains with Periodically Embedded Impurities. Acta Physica Polonica A. 2020. Vol. 137, no. 5. P. 631–633
24. Rojas O., Strečka J., de Souza S. M. Thermal entanglement and sharp specific-heat peak in an exactly solved spin-1/2 Ising-Heisenberg ladder with alternating Ising and Heisenberg inter-leg couplings. Solid State Communications. 2016. Vol. 246. P. 68–75.

25. Ezerskaya E. V. On the energy spectrum and thermodynamics of decorated quasi-one-dimensional magnetic systems with uniaxial anisotropy. *Low Temperature Physics*. 2021. Vol. 47, no. 6. P. 473–477.
26. Low-temperature thermodynamics of the two-leg ladder Ising model with trimer rungs: A mystery explained / T. Hutak et al. *Physics Letters A*. 2021. Vol. 387. P.
27. V.O. Cheranovskii, E.V. Ezerskaya, S.Ye. Kononenko. Low temperature magnetic properties of anisotropic spin ladder systems. IV International Conference “Condensed Matter & Low-Temperature Physics”, June 3 – 7, 2024, Kharkiv, Abstracts Book, 2024, 92.