

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

«___» червня 2024 р.

доц. Рашба Г.І. _____

«___» червня 2024 р.

Коваленко Вікторія Олександрівна

**Низькотемпературні властивості анізотропного спінового ланцюжка із
двома додатковими домішковими атомами-відростками**

Дипломна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
«Бакалавр» за спеціальністю
104 – «фізика та астрономія»

Науковий керівник:

канд. фіз.-мат. наук,

доц. Єзерська О.В.

Рецензент:

докт.фіз.-мат.наук

проф. Черановський В.О.

Харків 2024

Анотація

Коваленко В.О. Низькотемпературні властивості анізотропного спінового ланцюжка із двома додатковими домішковими атомами-відростками – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня “Бакалавр” за спеціальністю 104 – «фізика та астрономія». – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2024. - 35 ст. - Іл. 20.

Розглянуто модельну систему, складену з скінченного ХХ-ланцюжка з двома додатковими магнітними атомами-«відростками» з різними довільними ZZ-спінами S_1 та S_2 й об'єднуючим їх додатковим скінченим ХХ-ланцюжком. Проведено аналітичні та чисельні розрахунки точного енергетичного спектру моделі та комп'ютерне моделювання польових та температурних залежностей намагніченості та теплоємності, локальних термодинамічних характеристик.

Ключові слова: ХХ-ланцюжок, гамільтоніан Гейзенберга, перетворення Йордана–Вігнера, модель Ізінга, термодинамічні характеристики.

Abstract

Kovalenko V.O. Low-temperature properties of an anisotropic spin chain with two additional impurity atoms-branches - Manuscript.

Dissertation for the degree of Bachelor in the specialty 104 - Physics and Astronomy - Kharkiv: V. N. Karazin Kharkiv National University, 2024. - 35 p. - Ill. 20.

A model system consisting of a finite XX chain with two additional magnetic atoms-“branches” with different arbitrary ZZ spins S_1 and S_2 and an additional finite XX-chain connecting them is considered. Analytical and numerical calculations of the exact energy spectrum of the model and computer simulations of the field and temperature dependences of the magnetization and heat capacity, as well as local thermodynamic characteristics, are carried out.

Keywords: XX-chain, Heisenberg Hamiltonian, Jordan-Wigner transformation, Ising model, thermodynamic characteristics.

ЗМІСТ

ВСТУП.....	5
РОЗДІЛ 1. СПІНОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ МАГНЕТИЗМУ ...	7
1.1 Чотири моделі квантової теорії магнетизму: модель Гейзенберга, модель Ізінга, модель Хаббарда, s-d модель	7
1.1.1 Модель Гейзенберга	7
1.1.2 Модель Ізінга.....	8
1.1.3 Модель Хаббарда	9
1.1.4 Модель s-d.....	9
1.2 XX-ланцюжок зі спіном 1/2 – ідеальний газ безспінових ферміонів	10
1.3 XX ланцюжок із двома підгратками	11
РОЗДІЛ 2. СТАЦІОНАРНІ СТАНИ ДВОХ СКІНЧЕННИХ XX- ЛАНЦЮЖКІВ, ПОЄДНАНИХ ДВОМА ДОДАТКОВИМИ ВІДРОСТКАМИ	14
2.1 Гамільтоніан моделі.....	14
2.2. Перетворення та діагоналізація гамільтоніану моделі.....	15
2.3 XX-ланцюжок із двома відростками на двох проміжних вузлах.....	17
2.4 Скінченний XX-ланцюжок із двома домішками на кінцях	21
2.5 Спектри стаціонарних станів розглянутих частин моделей.....	23
РОЗДІЛ 3. НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНА ТЕРМОДИНАМІКА.....	26
3.1. Розрахунок статистичної суми	26
3.2. Дослідження намагніченості.....	28
3.3. Дослідження теплоємності.....	29
3.4. Дослідження середніх значень z-проекцій окремих спінів	30
ВИСНОВКИ	32
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	34

ВСТУП

Теоретичні дослідження низьковимірних спінових моделей є актуальною задачею сучасної теорії квантового магнетизму. Такі моделі мають цікаву «фізику», тому їхня поведінка, зокрема при низьких температурах, може бути суттєво відмінною від поведінки тривимірних магнетиків [1-3].

В даній роботі розглядається мезоскопічна структура – спінова модель, що побудована із двох скінченних спінових ланцюжків зі спіном $s = 1/2$ з ХХ-обмінною взаємодією. Ланцюжки пов'язані у двох точках через додаткові «ізінгівські» спіни довільної величини S_1 та S_2 таким чином, що нижній ланцюжок, пов'язаний обома кінцями із двома проміжними спінами на верхньому ланцюжку. Вибір саме ізінгівських зв'язків між ХХ-ланцюжками дозволяє звести дослідження термодинамічних властивостей моделі до розв'язання задачі про енергетичний спектр ефективних ХХ-ланцюжків із домішковими спінами $1/2$.

Метою дипломної роботи є теоретичне дослідження точного енергетичного спектру стаціонарних станів із одним переверненим спіном та низькотемпературної термодинаміки мезоскопічної спінової моделі, побудованої із двох ХХ-ланцюжків, зв'язаних через два додаткових спіни-відростки довільної величини ZZ (ізінгівською) взаємодією.

Нами були поставлені такі *завдання дослідження*:

- дослідити аналітично та чисельно спектр стаціонарних станів моделі;
- виконати точну діагоналізацію гамільтоніану моделі на основі отриманого спектру стаціонарних станів;
- розрахувати статистичну суму та провести комп'ютерне моделювання основних термодинамічних величин при низьких температурах.

Об'єктом дослідження є скінченна спінова система складної топології, що складається із двох ХХ-ланцюжків, пов'язаних через два ізінгівські спіни довільної величини.

Предметом є спектр стаціонарних станів та термодинамічні характеристики декорованих спінових драбин зі змішаною ХХ-ізінгівською взаємодією.

Практична цінність результатів, отриманих у даній роботі, полягає у тому, що отримані точні результати для спрощеної модельної системи можуть бути використані для наближеного опису реальних низькорозмірних спінових структур.

Достовірність наведених у роботі результатів підтверджується тим, що були використані стандартні методи розв'язання задач квантової теорії магнетизму, такі як перетворення Йордана – Вігнера, розв'язання одночастинкового рівняння Шредінгера, розрахунки статистичної суми та термодинамічних величин за відомими формулами статистичної фізики, чисельне моделювання за отриманими точними формулами.

РОЗДІЛ 1

СПІНОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ МАГНЕТИЗМУ

1.1 Чотири моделі квантової теорії магнетизму: модель Гейзенберга, модель Ізінга, модель Хаббарда, s-d модель

Відповідно до сучасних уявлень, сильний магнетизм твердих тіл існує завдяки обмінній взаємодії між електронами. Він виникає в тих випадках, коли кристалічна решітка включає атоми з частково заповненими внутрішніми оболонками. Такі матеріали спонтанно намагнічуються при досить низьких температурах. Це один із прикладів багаточастинкового явища. Ми не можемо нехтувати цією взаємодією в будь-якому розумному наближенні. Отже, ми маємо вирішити проблему багатьох тіл.

В основному, прогрес у цій галузі пов'язаний з побудовою великої кількості ґратчастих моделей. У цих моделях магнітні взаємодії більш або менш спрощені. Існує чотири основні моделі сильного магнетизму, такі як модель Ізінга, модель Гейзенберга, модель Хаббарда, модель s-d [4].

1.1.1 Модель Гейзенберга

В 1927 році був запропонований гамільтоніан Гейзенберга для опису ковалентного зв'язку в молекулі водню (див., наприклад, [1-5]). В сучасному вигляді цей гамільтоніан записав в 1929 році Дірак [6]. Для випадку довільних парних взаємодій різних спінів та довільної розмірності кристалічної решітки гамільтоніан Гейзенберга [3] має такий вигляд:

$$\mathbf{H} = \underbrace{-g\mu_B H \sum_i S_i^z}_{\text{Zeeman energy}} - \underbrace{\sum_{i \neq j} J_{ij} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j}_{\text{Exchange energy}}, \quad (1.1)$$

де

g – фактор Ланде,

μ_B – магнетон Бора,

H – зовнішнє постійне магнітне поле,

$\mathbf{S}_{i,j} = (S_{i,j}^x, S_{i,j}^y, S_{i,j}^z)$ – спіновий оператор i – того, j – того вузла,

$J_{ij} = \left(\left| \vec{r}_i - \vec{r}_j \right| \right)$ – обмінний інтеграл.

Точний розв’язок відомий тільки для одновимірного ланцюжка зі взаємодією найближчих сусідів. Метод був запропонований Г. Бете в 1931 році [4]. Він й досі є основним методом розрахунків енергетичного спектру магнетиків.

1.1.2 Модель Ізінга

Гамільтоніан записується таким чином:

$$\mathbf{H} = - \sum_i h_i \sigma_i - \sum_{i \neq j} J_{i,j} \sigma_i \sigma_j, \quad (\sigma_i = \pm 1).$$

Формулювання задачі феромагнетизму Ленца-Ізінга [3, 7] має такий вигляд: спіни розташовані через рівні проміжки по довжині одновимірного ланцюжка. Кожному спіну дозволено набувати значень ± 1 .

$$\mathbf{H} = - \sum_{n=1}^N h_n \sigma_n - \sum_{n=1}^N J_n \sigma_n \sigma_{n+1}, \quad (\sigma_n = \pm 1).$$

Ернст Ізінг розв’язав одновимірну модель Ізінга в 1925 році (див., наприклад [3, 7]) і виявив, що в цій моделі не існує фазового переходу по температурі від впорядкованого феромагнітного стану до парамагнітного. Одновимірна модель не може описати наявність дальнього порядку та спонтанної намагніченості. Використовуючи хибні аргументи, він дійшов до таких самих висновків і в двовимірній моделі Ізінга. Тільки в 1944 році, коли Онзагер розв’язав задачу про знаходження статистичної суми двовимірної квадратної решітки Ізінга, виявилось, що у двовимірній моделі є феромагнітне впорядкування.

1.1.3 Модель Хаббарда

Модель Хаббарда (див., наприклад, [4]), названа на честь Джона Хаббарда, є найпростішою моделлю взаємодії частинок у ґратці, що має лише два члени в гамільтоніані: кінетичний член, що дозволяє тунелювання ("стрибки") частинок між ділянками ґратки і потенціальний член, що складається з відштовхувальної взаємодії двох електронів з протилежними напрямками спінів, що знаходяться в одному й тому ж вузлі решітки

$$\mathbf{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (a_{m,\sigma}^\dagger a_{m+1,\sigma} + h.c.) + U \sum_i a_{i,\sigma}^\dagger a_{i,\sigma} a_{i,-\sigma}^\dagger a_{i,-\sigma},$$

де $h.c.$ – ермітово спряжене до $a_{m,\sigma}^\dagger a_{m+1,\sigma}$.

Модель Хаббарда застосовують для опису поведінки магнетиків, в яких є електрони провідності, що створюють вузькі енергетичні зони. Відомий точний розв'язок для моделі Хаббарда на одновимірній решітці, який був узагальненням методу Бете (див., наприклад, [4]).

1.1.4 Модель s-d

Дана модель [4] була запропонована Вонсовським в 1946 році. Відповідний гамільтоніан записується наступним чином:

$$\mathbf{H} = \sum_{\langle i,j \rangle, \sigma} t_{ij} (a_{m,\sigma}^\dagger a_{m+1,\sigma} + h.c.) + J \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{s}_i.$$

Перший доданок представляє електрони провідності (s-електрони в оригінальній моделі), що стрибають із місця i до місця j . Другий доданок містить локалізовані спінові оператори $\mathbf{S}_i$ (відповідні d-електронам у вихідній моделі) і спінові оператори $\mathbf{s}_i$ електрона провідності, який взаємодіє з локалізованим електроном $\mathbf{S}_i$, J (феромагнітна взаємодія).

Модель s-d можна точно розв'язати лише в одному вимірі за допомогою анзацу Бете, як показали Андрій [8] і Вігман [9], незалежно один від одного у 1980 році. Модель s-d складається з решітки парамагнітних домішок, які взаємодіють з електронами провідності.

1.2 XX-ланцюжок зі спіном 1/2 – ідеальний газ безспінових ферміонів

Дамо короткий опис діагоналізації гамільтоніану спінового ланцюжка для спрощеного випадку XX моделі. Гамільтоніан такої моделі має вигляд

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

Спочатку перейдемо в (1.2) до сходинок операторів за формулами

$$S_n^{\pm} = S_n^x \pm iS_n^y, \quad S_n^z = \frac{1}{2} - S_n^- S_n^+.$$

Наступний крок – перехід до фермі-операторів породження та знищення, що був запропонований для XX моделі в роботі Ліба–Шульца–Маттіса в 1961 р. [10]

$$S_n^- = a_n^+ \prod_{m<n} (1 - 2a_m^+ a_m), \quad S_n^+ = \prod_{m<n} (1 - 2a_m^+ a_m) a_n. \quad (1.3)$$

В термінах цих операторів гамільтоніан XX-ланцюжка буде квадратичним по операторам породження та знищення:

$$\hat{H} = -\frac{hN}{2} + h \sum_{n=1}^N a_n^+ a_n - \frac{J}{2} \sum_{n=1}^{N-1} (a_n^+ a_{n+1} + a_{n+1}^+ a_n),$$

тому він може бути точно діагоналізований за допомогою перетворення Фур'є.

Гамільтоніан такої моделі після виконання перетворення Фур'є виглядає так:

$$\hat{H} = \underbrace{-\mu_B H N}_{E_{ferro}} + \sum_k \underbrace{(2\mu_B H - J \cos k)}_{\varepsilon_k} a_k^\dagger a_k,$$

або

$$H = \sum_k \left(a_k^+ a_k - \frac{1}{2} \right) \varepsilon_k. \quad (1.4)$$

В наступному параграфі ми запропонуємо замість перетворення Фур'є скористатися розв'язком одночастинкового рівняння Шредінгера для діагоналізації схожого гамільтоніану нашої моделі.

1.3 XX ланцюжок із двома підґратками

Розглянуто точно розв'язувану модель спінового ланцюжка з двома підґратками, в якій взаємодія найближчих сусідів пов'язана лише з поперечними спіновими компонентами та є різною для лівих і правих сусідів [11]. Система зводиться до ідеального квазічастинкового фермі-газу. У спектрі збудження, що складається з двох гілок, є щілина, яка залежить від магнітного поля. При нульовій температурі магнітна сприйнятливості має дві кореневі особливості поля у точках, де щілина дорівнює нулю. Магнітне поле та температурна залежність сприйнятливості масиву подібна до відповідної залежності для антиферомагнетика. Розраховано парні спінові корелятори. У системі немає дальнього порядку. Важлива відмінність класичного розв'язку цієї ж задачі полягає в тому, що в полях, менших за поле насичення, в класичному випадку існує безщілинна «акустична» гілка спектра, якої насправді не існує.

1.4 Вплив домішок на властивості XX-ланцюжка

В роботі [12] вивчався вплив домішкового спіну на властивості XX-ланцюжка. Домішковий спін має обмінну взаємодію та g -фактор, що відмінні від інших вузлів. Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_{\substack{n=-\infty \\ (n \neq 0)}}^{\infty} S_n^z - g_0\mu_B H S_0^z - J \sum_{\substack{n=-\infty \\ (n \neq 0)}}^{\infty} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) - J_0 (S_0^x S_1^x + S_0^y S_1^y + S_{-1}^x S_0^x - S_{-1}^y S_0^y) \quad (1.5)$$

Наступні нерівності визначають умови появи додаткових домішкових рівнів

$$\left(\frac{J_0}{J}\right)^2 > 1 - \frac{\mu_B(g - g_0)H}{J}; \quad \left(\frac{J_0}{J}\right)^2 > 1 + \frac{\mu_B(g - g_0)H}{J}; \quad (1.6)$$

від смуги безперервного спектра з енергіями

$$E_{1,2} = g\mu_B H - \frac{J}{2\alpha^2 - 1} \left[\beta(1 - \alpha^2) \pm \alpha^2 \sqrt{\beta^2 + 2\beta^2 - 1} \right], \quad (1.7)$$

$$\text{де } \alpha = \frac{J_0}{J}, \quad \beta = \frac{\mu_B(g - g_0)H}{J}.$$

Якщо виконана тільки одна з нерівностей (1.7), то з'являється або рівень E_1 нижче смуги, або рівень E_2 вище неї, відповідно.

В статті [12] наведена така формула для намагніченості домішкового спіну:

$$\frac{m_0^z}{\mu_B} = g_0 \left(\frac{1}{2} - \frac{\alpha^2}{\pi} \int_0^{k_0} \frac{\sin^2 k dk}{|\beta + \cos k - \alpha^2 e^{ik}|^2} - \frac{1 - r_1^2}{1 + r_1^2 (2\beta^2 - 1)} \theta(-\varepsilon_1) \theta(\alpha^2 - \beta - 1) \right). \quad (1.8)$$

Інтеграл береться від 0 до $k_0 = \arccos(g\mu H/J)$. З виразу (1.8) видно, що момент m_0^z може мати стрибки, коли аргументи θ -функції дорівнюють нулю. Наявність домішки суттєво впливає на розподіл намагніченості у вузлах матриці.

При нульовій температурі середній спін у довільному вузлі ланцюжка виражається формулою

$$\begin{aligned} \langle S_n^z \rangle = & \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi} \left(k_0 - \frac{1}{2|n|} \sin 2k_0 |n| \right) - \frac{\alpha^2 (1 - r_1^2)}{1 + (2\alpha^2 - 1)r_1^2} r_1^{2|n|} \theta(\alpha^2 - \beta - 1) - \\ & - \frac{1}{\pi} \int_0^{k_0} dk \frac{\alpha^2 \sin k}{|\beta + \cos k - \alpha^2 e^{ik}|^2} \{ (\beta + \cos k) \sin 2k |n| - \beta^2 \sin k (2|n| - 1) \}. \end{aligned} \quad (1.9)$$

Для напівнескінченного ланцюжка з домішкою на кінці всі результати зберігаються при заміні $\alpha^2 \rightarrow \alpha^2/2$.

В роботі [13] виконано теоретичне дослідження квантових стаціонарних станів та термодинаміки двох точно розв'язуваних квантових моделей: скінченного ХХ-ланцюжка з «відростком», зв'язаним ZZ-взаємодією (ізінгівською) з одним із вузлів ланцюжка, та двох різних скінчених ХХ-ланцюжків, які з'єднані через додатковий ZZ-спін. Показано, що в спектрі поблизу домішкового спіну можуть існувати локалізовані домішкові рівні, знайдено умови їх появи. Досліджено польові та температурні залежності основних термодинамічних характеристик моделей.

Зокрема, було показано, що польова залежність теплоємності має складний характер з численними мінімумами і максимумами, а польова

залежність намагніченості при дуже низьких температурах може мати кінцеві стрибки, пов'язані з домішковими рівнями. При низьких температурах середнє значення домішкового спіну в разі антиферомагнітної ZZ-взаємодії з основним XX-ланцюжком має осцилюючу поведінку в слабкому магнітному полі та стрибок у критичному полі. Автори пояснили цей стрибок спін-фlop переходом додаткового спіну вздовж напрямку магнітного поля.

РОЗДІЛ 2

СТАЦІОНАРНІ СТАНИ ДВОХ СКІНЧЕННИХ ХХ-ЛАНЦЮЖКІВ, ПОЄДНАНИХ ДВОМА ДОДАТКОВИМИ ВІДРОСТКАМИ

2.1 Гамільтоніан моделі

В цьому розділі ми розглянемо енергетичний спектр точно розв'язуваної спінової моделі, побудованої на основі ХХ-ланцюжка. Запропонована модель є узагальненням моделі з роботи, яка доповідалась на міжнародній конференції в 2021 р. [14].

Ми хочемо дослідити вплив положення додаткових відростків на ланцюжку на спектр стаціонарних станів. Розглянемо таку модель (див. Рис. 2.1). Це скінченний ХХ-ланцюжок, у якому на двох проміжних вузлах n_1, n_2 розташовані додаткові відростки – zz-спіни, які поєднані ХХ-ланцюжком довжини N_2 .

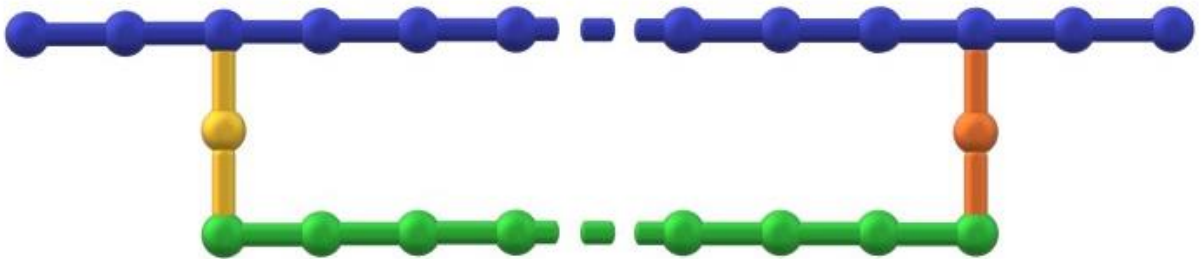


Рисунок 2.1 – Досліджувана модель

Гамільтоніан досліджуваної моделі має такий вигляд:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} (S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y) - \\
 & -g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} (S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y) - \\
 & -g'_1\mu_B H \tilde{S}_{n_1}^z - g'_2\mu_B H \tilde{S}_{n_2}^z - J'_1 \tilde{S}_{n_1}^z (S_{1,n_1}^z + S_{2,n_1}^z) - J'_2 \tilde{S}_{n_2}^z (S_{1,n_2}^z + S_{2,n_2}^z),
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

де

μ_B – магнетон Бора (при побудові графіків будемо вважати, що $\mu_B = 1$),

$J_{1,2}$ – константа взаємодії 1-го, 2-го, ланцюжків відповідно,

$J'_{1,2}$ – константа обмінної взаємодії, між вузлом $n_{1,2}$ і сусідніми вузлами на XX ланцюжках,

$g_{1,2}$ – g -фактор всіх вузлів 1-го, 2-го ланцюжків відповідно, окрім $g'_{1,2}$,

$g'_{1,2}$ – g -фактор на вузлі $n_{1,2}$,

H – зовнішнє постійне магнітне поле, спрямоване вздовж осі z ,

$S_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ – спіновий оператор n -го вузла.

2.2. Перетворення та діагоналізація гамільтоніану моделі

Відомо, що для дослідження спектру стаціонарних станів XX-ланцюжка доцільно перейти від спінових операторів $S_n = (S_n^x, S_n^y, S_n^z)$ до операторів породження $a_n^\dagger$ та знищення a_n за допомогою перетворення Йордана–Вігнера (1.3). Наявність домішок не впливає на можливість діагоналізації гамільтоніана моделі. Спочатку переходимо до сходинок операторів $S^\pm$ за допомогою перетворень

$$S_{i,n}^\pm = S_{i,n}^x \pm iS_{i,n}^y; \quad S_{i,n}^z = \frac{1}{2} - S_{i,n}^- S_{i,n}^+; \quad i = 1, 2.$$

Потім користуємось формулами, аналогічними (1.3).

Отримуємо

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left(\frac{1}{2} - S_{1,n}^- S_{1,n}^+ \right) - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(\frac{1}{2} (S_{1,n}^- S_{1,n+1}^+ + S_{1,n}^+ S_{1,n+1}^-) \right) - \\ & -g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left(\frac{1}{2} - S_{2,n}^- S_{2,n}^+ \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(\frac{1}{2} (S_{2,n}^- S_{2,n+1}^+ + S_{2,n}^+ S_{2,n+1}^-) \right) - \\ & -g'_1 \mu_B H \tilde{S}_{n_1}^z - g'_2 \mu_B H \tilde{S}_{n_2}^z - J'_1 \tilde{S}_{n_1}^z (1 - S_{1,n_1}^- S_{1,n_1}^+ - S_{2,n_1}^- S_{2,n_1}^+) - J'_2 \tilde{S}_{n_2}^z (1 - S_{1,n_2}^- S_{1,n_2}^+ - S_{2,n_2}^- S_{2,n_2}^+). \end{aligned}$$

Наступним кроком пишемо гамільтоніан через оператори породження $a_n^\dagger$ та знищення a_n

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left(\frac{1}{2} - a_{1,n}^\dagger a_{1,n} \right) - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) - \\
& -g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left(\frac{1}{2} - a_{2,n}^\dagger a_{2,n} \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right) - g'_1\mu_B H \sigma_1 - \quad (2.2) \\
& -g'_2\mu_B H \sigma_2 - J'_1\sigma_1 \left(1 - a_{1,n_1}^\dagger a_{1,n_1} - a_{2,1}^\dagger a_{2,1} \right) - J'_2\sigma_2 \left(1 - a_{1,n_2}^\dagger a_{1,n_2} - a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right).
\end{aligned}$$

В записі (2.2) враховано, що оператори S_1^z і S_2^z комутують, тому можуть бути замінені на власні числа σ_1 і σ_2 відповідно.

Перепишемо гамільтоніан (2.2) в наступному вигляді

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) + \\
& + g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right) - \quad (2.3) \\
& -J'_1\sigma_1 \left(a_{1,n_1}^\dagger a_{1,n_1} - a_{2,1}^\dagger a_{2,1} \right) - J'_2\sigma_2 \left(a_{1,n_2}^\dagger a_{1,n_2} - a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right) + E_{ferro},
\end{aligned}$$

де введено енергію стану, який ми умовно назвали «ферромагнітним»

$$E_{ferro} = - \left[\frac{g_1\mu_B H N_1}{2} + (J'_1 + g'_1\mu_B H) \sigma_1 + \frac{g_2\mu_B H N_2}{2} + (J'_2 + g'_2\mu_B H) \sigma_2 \right].$$

Гамільтоніан (2.3) фактично розпався на дві частини: гамільтоніан ХХ-ланцюжка з двома відростками на двох проміжних вузлах

$$\begin{aligned}
\hat{H}_1(\sigma_1, \sigma_2) = & g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) + \\
& -J'_1\sigma_1 a_{1,n_1}^\dagger a_{1,n_1} - J'_2\sigma_2 a_{1,n_2}^\dagger a_{1,n_2} + E_{1,ferro}; \quad (2.4) \\
E_{1,ferro} = & -\frac{1}{2} \left[\frac{g_1\mu_B H N_1}{2} + (J'_1 + g'_1\mu_B H) \sigma_1 + (J'_2 + g'_2\mu_B H) \sigma_2 \right]
\end{aligned}$$

та гамільтоніан ХХ-ланцюжка з двома домішковими ізінгівськими спінами на обох кінцях

$$\begin{aligned}
\hat{H}_2(\sigma_1, \sigma_2) = & g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right) + \\
& -J'_1\sigma_1 a_{2,1}^\dagger a_{2,1} - J'_2\sigma_2 a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} + E_{2,ferro}; \quad (2.5) \\
E_{2,ferro} = & -\frac{1}{2} \left[\frac{g_2\mu_B H N_2}{2} + (J'_1 + g'_1\mu_B H) \sigma_1 + (J'_2 + g'_2\mu_B H) \sigma_2 \right].
\end{aligned}$$

Енергетичний спектр цих гамільтоніанів можна розглядати незалежно, хоча вони і пов'язані двома параметрами σ_1 і σ_2 . Розглянемо окремо кожен із двох гамільтоніанів – скінченного ХХ-ланцюжка з двома домішками на проміжних вузлах і скінченного ХХ-ланцюжка з домішками на обох кінцях.

2.3 ХХ-ланцюжок із двома відростками на двох проміжних вузлах

Розглянемо спектр стаціонарних станів.

Стан без збуджень $|0\rangle$ визначаємо таким чином. Дія оператора знищення на стан вакууму дає нуль.

$$a_n|0\rangle = 0, \quad n=1, \dots, N.$$

Тривіальний розв'язок рівняння Шредінгера (РШ) в цьому випадку має вигляд

$$\hat{H}_1|0\rangle = E_{1, ferro}|0\rangle.$$

Стан з одним збудженням побудуємо таким чином:

$$\hat{H}_1|1\rangle = (E_{1, ferro} + \varepsilon)|1\rangle, \quad |1\rangle = \sum_{m=1}^N A_m a_m^\dagger |0\rangle.$$

Ми побудували стан із одним перевернутим спіном за допомогою дії операторів для всіх вузлів ґратки народження на вакуумний стан $|0\rangle$. Дія оператора знищення на $|0\rangle$ завжди дає нуль: $a_n|0\rangle = 0$. Для отримання рівнянь у скінченних різницях для хвильової функції треба «перенести» оператори знищення a_n , які є в гамільтоніані (2.4) або (2.5) за допомогою комутаційних співвідношень фермі-операторів направо, щоб скористатись умовою $a_n|0\rangle = 0$.

Основне рівняння:

$$(\varepsilon - h)A_n + \frac{J_1}{2}(A_{n-1} + A_{n+1}) = 0; \quad 1 < n < N_1; \quad n \neq n_1, n_2. \quad (2.6)$$

Граничні умови:

$$\begin{aligned} A_0 &= 0; \quad A_{N_1+1} = 0; \\ (\varepsilon - h_1)A_{n_1} + \frac{J_1}{2}(A_{n_1-1} + A_{n_1+1}) &= 0; \\ (\varepsilon - h_2)A_{n_2} + \frac{J_1}{2}(A_{n_2-1} + A_{n_2+1}) &= 0. \end{aligned}$$

Шукаємо частинний розв'язок основного рівняння (2.6) у вигляді x^n .
Отримуємо енергію, яка виражається за допомогою параметру x :

$$\varepsilon = h - \frac{J_1}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right) \quad (2.7)$$

Загальний розв'язок основного рівняння – хвильова функція (ХФ) у вузловому зображенні:

$$A_n = \begin{cases} C_1 x^n + C_2 x^{-n}, & 1 \leq n \leq n_1; \\ C_3 x^n + C_4 x^{-n}, & n_1 \leq n \leq n_2; \\ C_5 x^n + C_6 x^{-n}, & n_2 \leq n \leq N. \end{cases} \quad (2.8)$$

Скористаємось спочатку граничними умовами на кінцях ланцюжка:

$$\begin{aligned} A_0 &= 0; & C_1 + C_2 &= 0; \\ A_{N+1} &= 0; & C_5 x^{N+1} + C_6 x^{-N-1} &= 0. \end{aligned}$$

Умови неперервності хвильової функції дають такі співвідношення між параметрами хвильової функції

$$\begin{aligned} C_3 x^{n_1} + C_4 x^{-n_1} &= C_1 x^{n_1} + C_2 x^{-n_1}; \\ C_3 x^{n_2} + C_4 x^{-n_2} &= C_5 x^{n_2} + C_6 x^{-n_2}. \end{aligned}$$

Утворюємо системи рівнянь для вираження констант. Для цього доцільно пов'язати рівняння через спільні вузли $n_{1,2}$.

Для випадку з вузлом n_1

$$\begin{cases} C_1 \left(x^{n_1} - x^{-n_1} \right) \left(h - \frac{J}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right) - h_1 \right) + \frac{J}{2} \left[C_1 \left(x^{n_1-1} - x^{1-n_1} \right) + C_3 x^{n_1+1} + C_4 x^{-n_1-1} \right] = 0; \\ C_1 \left(x^{n_1} - x^{-n_1} \right) = C_3 x^{n_1} + C_4 x^{-n_1}; \end{cases}$$

C_3, C_4 , виражені через C_1 :

$$C_3 = C_1 \left(1 + \beta_1 \frac{x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1} \right); \quad C_4 = -C_1 \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1} - 1)}{x^2 - 1} \right).$$

Було введено заміну $\beta_1 = \frac{2J'_1 \sigma_{n_1}}{J_1}$.

Для випадку з вузлом n_2

$$\begin{cases} C_5 \left(x^{n_2} - x^{2(N+1)-n_2} \right) \left(h - \frac{J_1}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right) - h_2 \right) + \frac{J_1}{2} \left[C_5 \left(x^{n_2+1} - x^{2(N+1)-n_2-1} \right) + C_3 x^{n_2-1} + C_4 x^{1-n_2} \right] = 0; \\ C_5 \left(x^{n_2} - x^{2(N+1)-n_2} \right) = C_3 x^{n_2} + C_4 x^{-n_2}; \end{cases}$$

C_3, C_4 виражені через C_5 :

$$C_3 = C_5 \left(1 + \beta_2 \frac{x \left(x^{2(N+1-n_2)} - 1 \right)}{1 - x^2} \right); \quad C_4 = C_5 \left(x^{2(N+1)} + \beta_2 \frac{x \left(x^{2(N+1)} - x^{n_2} \right)}{x^2 - 1} \right).$$

Було введено заміну $\beta_2 = \frac{2J'_2 \sigma_{n_2}}{J_1}$.

Підставляючи отримані константи в (2.8), отримуємо ХФ у вузельному зображенні для ефективного гамільтоніану першого з ХХ-ланцюжків.

$$A_n = \begin{cases} C_1 \left(x^n - x^{-n} \right), 1 \leq n \leq n_1; \\ C_1 \left[\left(1 + \beta_1 \frac{x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1} \right) x^n - \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1} - 1)}{x^2 - 1} \right) x^{-n} \right], n_1 \leq n \leq n_2; \\ C_1 \frac{x^2 - 1 + \beta_1 x(1 - x^{-2n_1})}{1 - x^2 + \beta_2 x(1 - x^{2(N+1-n_2)})} \left(x^{2(N+1)-n} - x^n \right), n_2 \leq n \leq N. \end{cases}$$

Для знаходження локальних термодинамічних характеристик (середніх значень спінів на ХХ-ланцюжку) нам треба знайти нормування хвильової функції:

$$\sum_{n=1}^N |A_n|^2 = 1;$$

$$\begin{aligned} |C_1|^2 & \left(\sum_{n=1}^{n_1} |x^n - x^{-n}|^2 + \sum_{n=n_1+1}^{n_2} \left| \left(1 + \beta_1 \frac{x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1} \right) x^n - \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1} - 1)}{x^2 - 1} \right) x^{-n} \right|^2 + \right. \\ & \left. + \sum_{n=n_2+1}^N \left| \frac{x^2 - 1 + \beta_1 x(1 - x^{-2n_1})}{\beta_2 x(-x^{2(N+1-n_2)} + 1) + 1 - x^2} \left(x^{2(N+1)-n} - x^n \right) \right|^2 \right) = 1. \end{aligned}$$

Виражаємо нормувальний множник C_1 (під модулем та в квадраті для зручності подальших обчислень):

$$|C_1|^2 = \left(\sum_{n=1}^{n_1} |x^n - x^{-n}|^2 + \sum_{n=n_1+1}^{n_2} \left| \left(1 + \beta_1 \frac{x(1-x^{-2n_1})}{x^2-1} \right) x^n - \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1}-1)}{x^2-1} \right) x^{-n} \right|^2 + \right. \\ \left. + \sum_{n=n_2+1}^N \left| \frac{x^2-1+\beta_1 x(1-x^{-2n_1})}{\beta_2 x(-x^{2(N+1-n_2)}+1)+1-x^2} (x^{2(N+1)-n} - x^n) \right|^2 \right)^{-1}.$$

Отримали наступне рівняння для визначення параметру x (далі всюди буде замінено на x_1 , щоб підкреслити, що це розв'язок для ланцюжка №1).

Параметр x_1 визначає енергії

$$\left(1 + \beta_1 x_1 \frac{(1-x_1^{-2n_1})}{x_1^2-1} \right) \left(1 + \beta_2 x_1 \frac{(1-x_1^{-2(N+1-n_2)})}{x_1^2-1} \right) x_1^{2(N+1)} - \\ - \left(1 + \beta_1 x_1 \frac{(1-x_1^{2n_1})}{1-x_1^2} \right) \left(1 + \beta_2 x_1 \frac{(1-x_1^{2(N+1-n_2)})}{1-x_1^2} \right) = 0.$$

Для аналізу появи локалізованих станів, тобто наявності розв'язків із дійсними значеннями x_1 , $|x_1| < 1$, позбавимось в дисперсійному рівнянні від'ємних степенів. Після простих перетворень отримуємо:

$$x_1^{2(N_1+1)} - 1 + \beta_1 \beta_2 \frac{x_1^2}{(1-x_1^2)^2} (x_1^{2(n_2-n_1)} - 1)(x_1^{2n_2} - 1)(1-x_1^{2(N_1+1-n_2)}) + \\ + \beta_1 \frac{x_1}{(1-x_1^2)} (1-x_1^{2n_1})(x_1^{2(N_1+1-n_1)} - 1) + \beta_2 \frac{x_1}{(1-x_1^2)} (1-x_1^{2n_2})(x_1^{2(N_1+1-n_2)} - 1) = 0.$$

Розглянемо граничний випадок нескінченного ланцюжка та нескінченної відстані між «домішковими» вузлами $n_2 - n_1 \rightarrow \infty$. Дисперсійне рівняння в цьому граничному випадку розпадається на два незалежні рівняння

$$(x_1^2 - \beta_1 x_1 - 1)(x_1^2 - \beta_2 x_1 - 1) = 0,$$

які розв'язуються аналітично

$$x_1^{(1,2)} = \frac{1}{2} \left(\beta_{1,2} - \text{sign}(\beta_{1,2}) \sqrt{\beta_{1,2}^2 + 4} \right).$$

Ми навели тільки ті розв'язки, які відповідають $|x_1| < 1$. Очевидно, що такі розв'язки є при будь-яких ненульових значеннях параметрів $\beta_{1,2}$, тобто довільно малих значеннях ізінгівської взаємодії $J'_{1,2}$.

Нехай ланцюжок залишається нескінченним, але відстань між домішками-відростками стає скінченною. Дисперсійне рівняння тепер виглядатиме так:

$$\beta_1 \beta_2 x_1^2 (x_1^{2(n_2-n_1)} - 1) + (\beta_1 + \beta_2) x_1 (1 - x_1^2) + (1 - x_1^2)^2 = 0.$$

Перепишемо останнє рівняння так:

$$\left[\beta_1 \beta_2 x_1^2 \sum_{l=0}^{n_2-n_1-1} x_1^{2l} - (\beta_1 + \beta_2) x_1 - (1 - x_1^2) \right] (1 - x_1^2) = 0$$

і відкинемо тривіальні розв'язки $x_1 = \pm 1$

$$\beta_1 \beta_2 x_1^2 \sum_{l=0}^{n_2-n_1-1} x_1^{2l} - (\beta_1 + \beta_2) x_1 - (1 - x_1^2) = 0.$$

Тепер можна замінити параметр x_1 на критичні значення $x_1 = \pm 1$ та отримати критичне значення відстані між відростками:

$$\frac{1}{\beta_1} + \frac{1}{\beta_2} = \pm(n_2 - n_1).$$

Аналіз для загального випадку зараз проводити не будемо.

2.4 Скінченний ХХ-ланцюжок із двома домішками на кінцях

Гамільтоніан досліджуваної моделі визначається формулою (2.5). Розв'язки одночастинкового рівняння Шредінгера

$$\hat{H}_2 |1\rangle = (E_{2, ferro} + \varepsilon) |1\rangle$$

знову шукаємо у вигляді

$$|1\rangle = \sum_{m=1}^N A_m a_m^\dagger |0\rangle.$$

Основне рівняння та відповідні граничні умови є такими:

$$(\varepsilon - h)B_n + \frac{J_2}{2}(B_{n-1} + B_{n+1}) = 0; \quad 2 < n < N_2;$$

$$(\varepsilon - h_1)B_1 + \frac{J_2}{2}B_2 = 0;$$

$$(\varepsilon - h_2)B_{N_2} + \frac{J_2}{2}B_{N_2-1} = 0.$$

З основного рівняння знаходимо

$$\varepsilon = h - \frac{J_2}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right).$$

Загальний розв'язок шукаємо у вигляді

$$B_n = C_1 x^n + C_2 x^{-n}, \quad 1 \leq n \leq N_2.$$

Граничні рівняння визначають співвідношення між коефіцієнтами хвильової функції

$$\begin{cases} (\gamma_1 x - 1)C_1 + \left(\frac{\gamma_1}{x} - 1 \right)C_2 = 0; \\ \left(\frac{\gamma_2}{x} - 1 \right)x^{N_2+1}C_1 + (\gamma_2 x - 1)x^{-(N_2+1)}C_2 = 0. \end{cases}$$

Знаходимо дисперсійне рівняння

$$(\gamma_1 x - 1)(\gamma_2 x - 1) - \left(\frac{\gamma_1}{x} - 1 \right) \left(\frac{\gamma_2}{x} - 1 \right) x^{2(N_2+1)} = 0,$$

$$\text{тут } \gamma_{1,2} = \frac{2J'_{1,2}\sigma_{n_{1,2}}}{J_2}.$$

Проаналізуємо умови появи локалізованих станів – розв'язків $|x| \leq 1$.

Дослідимо спочатку випадок нескінченного ланцюжка. У рівнянні

$$(\gamma_1 x - 1)(\gamma_2 x - 1) - \left(\frac{\gamma_1}{x} - 1 \right) \left(\frac{\gamma_2}{x} - 1 \right) x^{2(N_2+1)} = 0$$

для $|x| < 1$ треба відкинути другий доданок, оскільки для ланцюжка нескінченної довжини $x^{2(N_2+1)} \rightarrow 0$. Дисперсійне рівняння

$$(\gamma_1 x - 1)(\gamma_2 x - 1) = 0$$

має в граничному випадку два незалежні аналітичні розв'язки:

$$x_{01} = \frac{1}{\gamma_1}; \quad x_{02} = \frac{1}{\gamma_2}.$$

Умови появи локальних рівнів мають вигляд:

$$|\gamma_{1,2}| \geq 1,$$

або в явному вигляді напишемо так:

$$2|J'_{1,2}\sigma_{1,2}| \geq |J_2|.$$

Переходимо до аналізу загального дисперсійного рівняння. Спочатку позбавимось тривіальних розв'язків, для чого перепишемо рівняння у вигляді

$$\begin{aligned} \gamma_1\gamma_2x^2(1-x^{2(N_2-1)})-(\gamma_1+\gamma_2)x(1-x^{2N_2})+(1-x^{2(N_2+1)})=0; \\ (1-x^2)\left[\gamma_1\gamma_2x^2\sum_{l=0}^{N_2-2}x^{2l}-(\gamma_1+\gamma_2)x\sum_{l=0}^{N_2-1}x^{2l}+\sum_{l=0}^{N_2}x^{2l}\right]=0. \end{aligned}$$

Відкидаємо тривіальні розв'язки та отримуємо наступне співвідношення між критичними значеннями параметрів, поклавши $x = \pm 1$:

$$\gamma_1\gamma_2(N_2-1) \mp (\gamma_1+\gamma_2)N_2 + N_2 + 1 = 0.$$

Критичне значення довжини ланцюжка визначається формулою

$$N_2 = \left\lfloor \frac{\gamma_1\gamma_2 - 1}{(\gamma_1 - 1)(\gamma_2 - 1)} \right\rfloor.$$

2.5 Спектри стаціонарних станів розглянутих частин моделей

Так як розв'язки стаціонарного рівняння Шредінгера для станів із одним перевернутим спіном для досліджуваної системи можна розглядати незалежно, спочатку зобразимо окремо спектри стаціонарних станів кожної з частин, які були досліджені в параграфах 2.3 та 2.4.

Згідно з обраними значеннями параметрів, кожен спектр має по 8 локальних домішкових рівнів. На рис. 2.2 це чітко прослідковується, а для рис. 2.3 необхідно уточнити, що рівні дуже близькі один до одного. В цьому можна впевнитись, поглянувши на значення енергії рівнів, які отримали при чисельних розрахунках:

$$\begin{aligned} \{-5.075, 10.631, -5.585, 10.37, 5.585, -10.37, 5.075, 10.631\} \text{ (для рис. 2.2),} \\ \{-10.625, -6.25, 10.625, -6.25, 6.25, -10.625, 6.25, 10.625\} \text{ (для рис. 2.3).} \end{aligned}$$

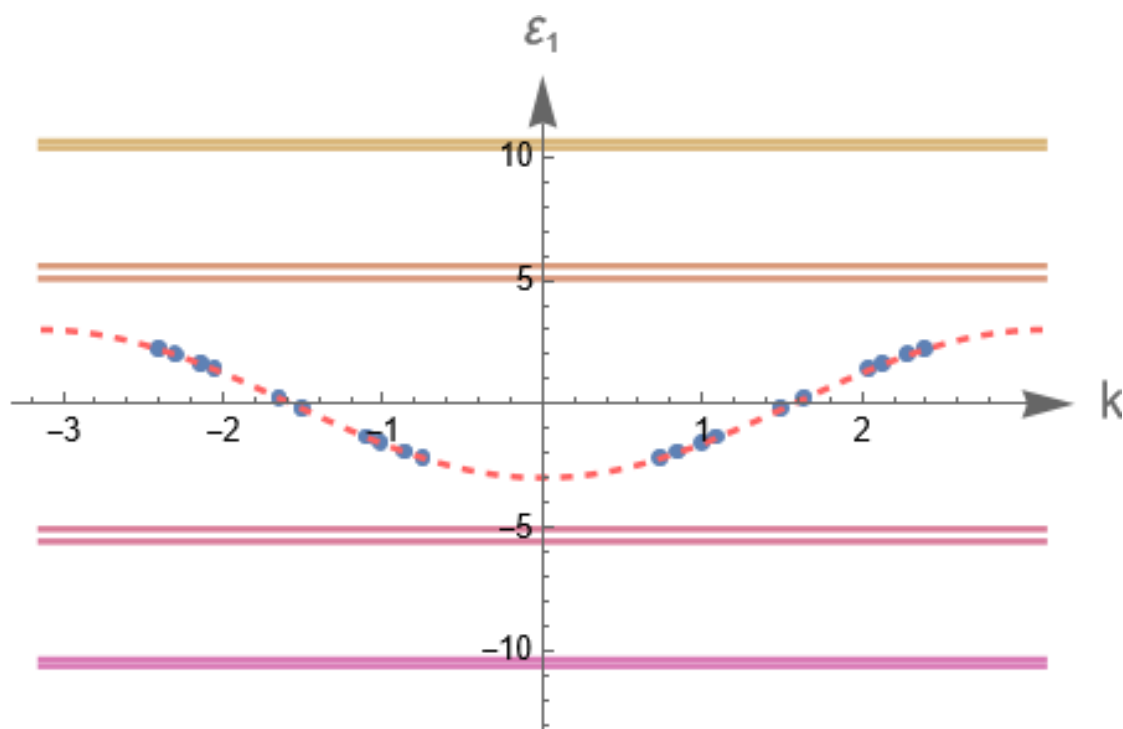


Рисунок 2.2 – Структура спектру системи «XX-ланцюжок з двома відростками на двох проміжних вузлах» з параметрами $J_1 = 3K$; $J_2 = 5K$;

$$J'_1 = 10K; J'_2 = 20K; S_1 = S_2 = \frac{1}{2}; n_1 = 4; n_2 = 5; N_1 = 7; N_2 = 11; H = 0.$$

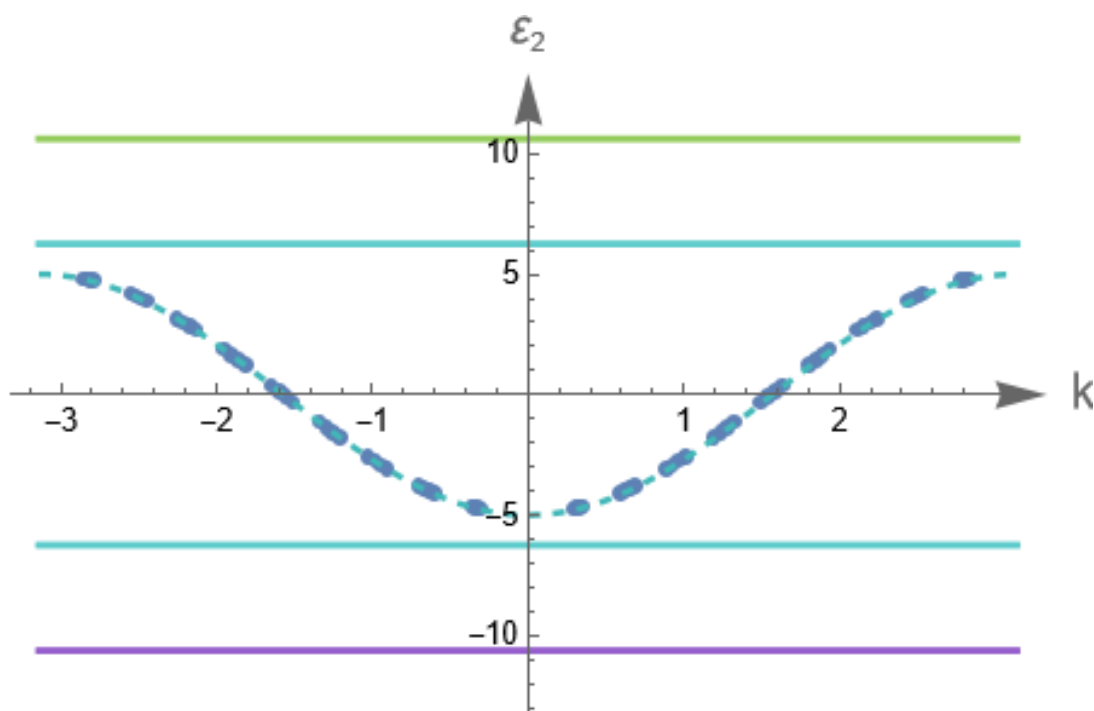


Рисунок 2.3 – Структура спектру системи «Скінченний XX-ланцюжок із двома домішками на кінцях» при $J_1 = 3K$; $J_2 = 5K$; $J'_1 = 10K$; $J'_2 = 20K$; $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$;

$$n_1 = 4; n_2 = 5; N_1 = 7; N_2 = 11; H = 0.$$

Так як розглядаємо «суцільну» модель, то наведемо також загальну структуру спектра.

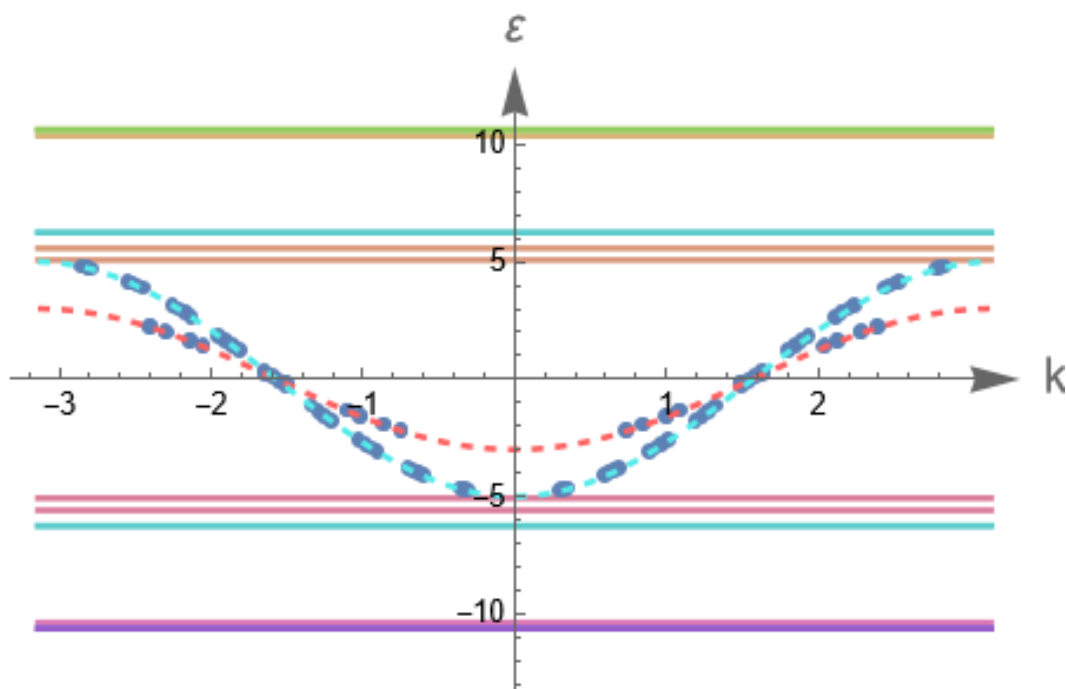


Рисунок 2.4 – Структура спектрів обох вищенаведених систем при тих самих значеннях параметрів

В розділі 3 побачимо, що наявність домішкових рівнів може суттєво вплинути на поведінку термодинамічних величин при достатньо низьких температурах.

РОЗДІЛ 3

НИЗЬКОТЕМПЕРАТУРНА ТЕРМОДИНАМІКА

3.1. Розрахунок статистичної суми

Досліджувана модель була зведена до гамільтоніану ідеального газу ферміонів, тому можемо скористатись методом знаходження статистичної суми для фермі-газу.

Маємо два ХХ-ланцюжки з гамільтоніанами (2.4) та (2.5). Нам треба знайти статсуми для обох ланцюжків, спочатку зафіксувавши одночасно значення параметрів σ_1, σ_2 , а потім підсумувавши по ним. Отримуємо наступну формулу:

$$Z = \sum_{\sigma_1=-S_1}^{S_1} \sum_{\sigma_2=-S_2}^{S_2} Z_1(\sigma_1, \sigma_2) Z_2(\sigma_1, \sigma_2) \quad (3.1)$$

Тут статистичні суми для кожного з двох «ефективних» ХХ-ланцюжків при фіксованих значеннях параметрів σ_1, σ_2 визначаються формулами

$$Z_1(\sigma_1, \sigma_2) = e^{-\frac{E_{1,ferro}(\sigma_1, \sigma_2)}{T}} \text{Tr} \left(\exp \left[-\frac{1}{T} \sum_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} \varepsilon_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} b_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}}^\dagger b_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} \right] \right),$$

$$Z_2(\sigma_1, \sigma_2) = e^{-\frac{E_{2,ferro}(\sigma_1, \sigma_2)}{T}} \text{Tr} \left(\exp \left[-\frac{1}{T} \sum_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} \varepsilon_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} b_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}}^\dagger b_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} \right] \right).$$

Для системи невзаємодіючих ферміонів існують тільки стани з кількістю частинок або 0, або 1 (принцип заборони Паулі), тому після підсумовування по всіх можливих значеннях параметру $\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}$ статсуми виглядатимуть так:

$$Z_i(\sigma_1, \sigma_2) = \exp \left[-\frac{E_{i,ferro}}{T} \right] \prod_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} \left\{ 1 + \exp \left[-\frac{1}{T} \left(h - \frac{1}{2} J \left(x_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}} + \frac{1}{x_{\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}}} \right) \right) \right] \right\}.$$

Таким чином ми й вивели формулу (3.1).

Наведено для довідки основні формули для отримання термодинамічних величин за допомогою статистичної суми.

Вільна енергія повної системи:

$$F = -T \ln Z .$$

Намагніченість:

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

в розрахунку для одного спіну:

$$M_{(1)} = -\left(\frac{1}{N_1 + N_2 + 2}\right) \frac{\partial F}{\partial H}.$$

Магнітна сприйнятливість:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}.$$

Внутрішня енергія:

$$E = -\left(\frac{1}{N_1 + N_2 + 2}\right) T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T}\right).$$

Теплоємність:

$$C = \frac{\partial E}{\partial H}.$$

Середнє значення проєкції спінів-відростків на вісь Z знайдемо так:

$$\begin{aligned} \langle S_1^z \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sigma_1 Z_1(\sigma_1, \sigma_2) Z_2(\sigma_1, \sigma_2); \\ \langle S_2^z \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sigma_2 Z_1(\sigma_1, \sigma_2) Z_2(\sigma_1, \sigma_2). \end{aligned} \quad (3.2)$$

Парний корелятор:

$$\langle S_1^z S_2^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma_1, \sigma_2} \sigma_1 \sigma_2 Z_1(\sigma_1, \sigma_2) Z_2(\sigma_1, \sigma_2). \quad (3.3)$$

Ми будемо чисельно моделювати польові та температурні залежності намагніченості та теплоємності.

3.2. Дослідження намагніченості

Наведемо польові залежності намагніченості у випадку антиферромагнітної взаємодії. Стрибки в сильному полі ілюструють переворот спінів-відростків. При нульовій температурі ми спостерігали б скінченні стрибки. Зі збільшенням температури ці стрибки поступово зникають, але при температурах значно менших ніж обмінні константи бачимо на рисунках залишки цих стрибків.

Наведені нижче графіки також показують вплив зміни довжини ланцюжків (вважаємо, що вони мають однакову довжину для кожного з випадків відповідно). Як можемо бачити, її збільшення «згладжує» стрибки на графіках.

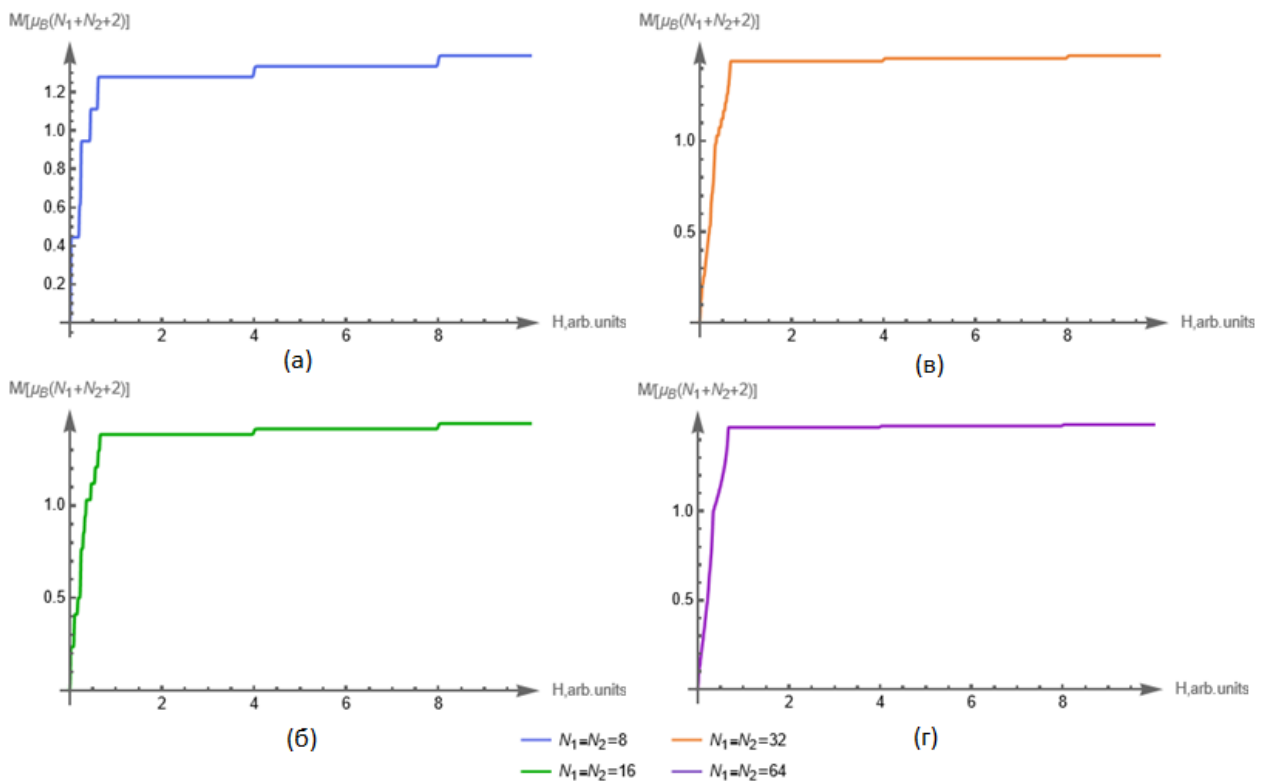


Рисунок 3.1 – Польові залежності намагніченості, залежно від довжини XX-ланцюжків при $J_1 = 1K$; $J_2 = 2K$; $J'_1 = -8K$; $J'_2 = -4K$; $g_1 = g_2 = 3$; $g'_1 = g'_2 = 1$;

$$S_1 = S_2 = \frac{1}{2}; n_1 = 4; n_2 = 5; T = 0.01K;$$

при (а) $N_1 = N_2 = 8$; (б) $N_1 = N_2 = 16$; (в) $N_1 = N_2 = 32$; (г) $N_1 = N_2 = 64$.

На рис. 3.2 ми зібрали профілі намагніченості для різних довжин ланцюжків. Легко бачили, що зі збільшенням довжини ланцюжків вплив

домішкових рівнів зменшується – стрибки стають майже непомітними. Це стосується й стрибків, пов'язаних із переворотами окремих спінів на самих ланцюжках.

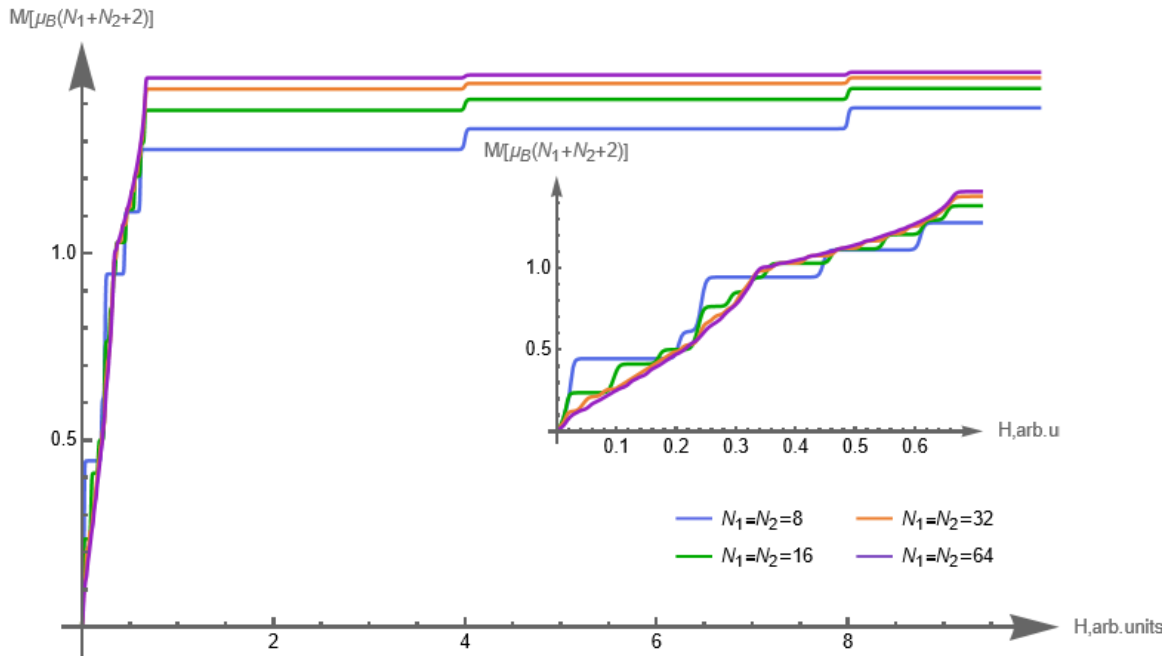


Рисунок 3.2 – Польові залежності намагніченості зі збільшенням довжини ланцюжків при тих самих параметрах, що й на рис. 3.1

3.3. Дослідження теплоємності

Як ми бачимо на рис 3.3, зі збільшенням взаємодії відростків із ланцюжками з'являються додаткові максимуми в температурній залежності теплоємності. Ефекти скінченності кількості спінів у ланцюжках проявляються при дуже низьких температурах в існуванні додаткових мінімумів і максимумів.

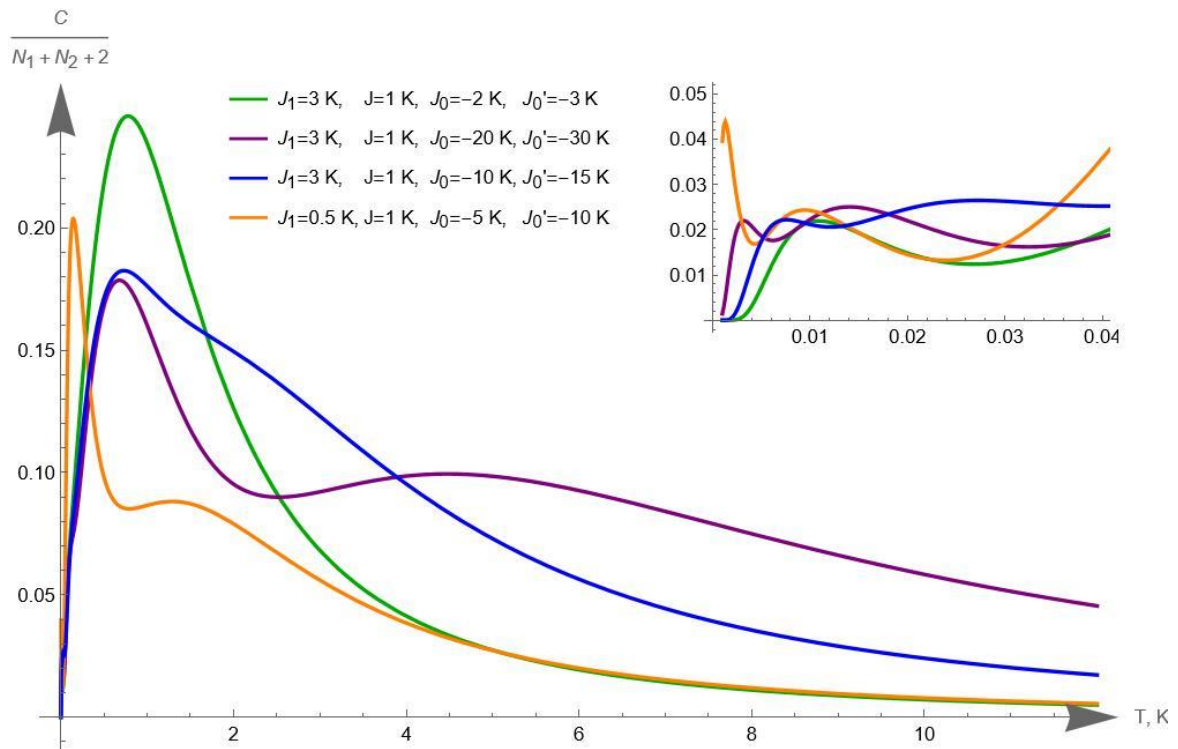


Рисунок 3.3 – Температурна залежність теплоємності при різних значеннях параметрів обмінної взаємодії в нульовому магнітному полі при $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$;

$$N_1 = N_2 = 16; n_1 = 4; n_2 = 12$$

3.4. Дослідження середніх значень z-проекцій окремих спінів

Ми провели чисельне моделювання польових залежностей z-проекцій спінів-відростків. Виявилось, що поведінка може бути нестійкою та зі збільшенням поля орієнтація z-проекцій кілька разів змінюватись. Ми дослідили як впливає на $\langle S_{1,2}^z \rangle / S_{1,2}$ відстань між домішковими відросткам. На рис. 3.4 наведені відповідні графіки $\langle S_{1,2}^z \rangle / S_{1,2}$ для різних відстаней між відростками. А також парні кореляційні функції $\langle S_1^z S_2^z \rangle / (S_1 S_2)$, які також демонструють можливість антипаралельної орієнтації спінів-відростків у досить сильних полях. Після досягнення критичного поля обидва відростки орієнтуються по полю.

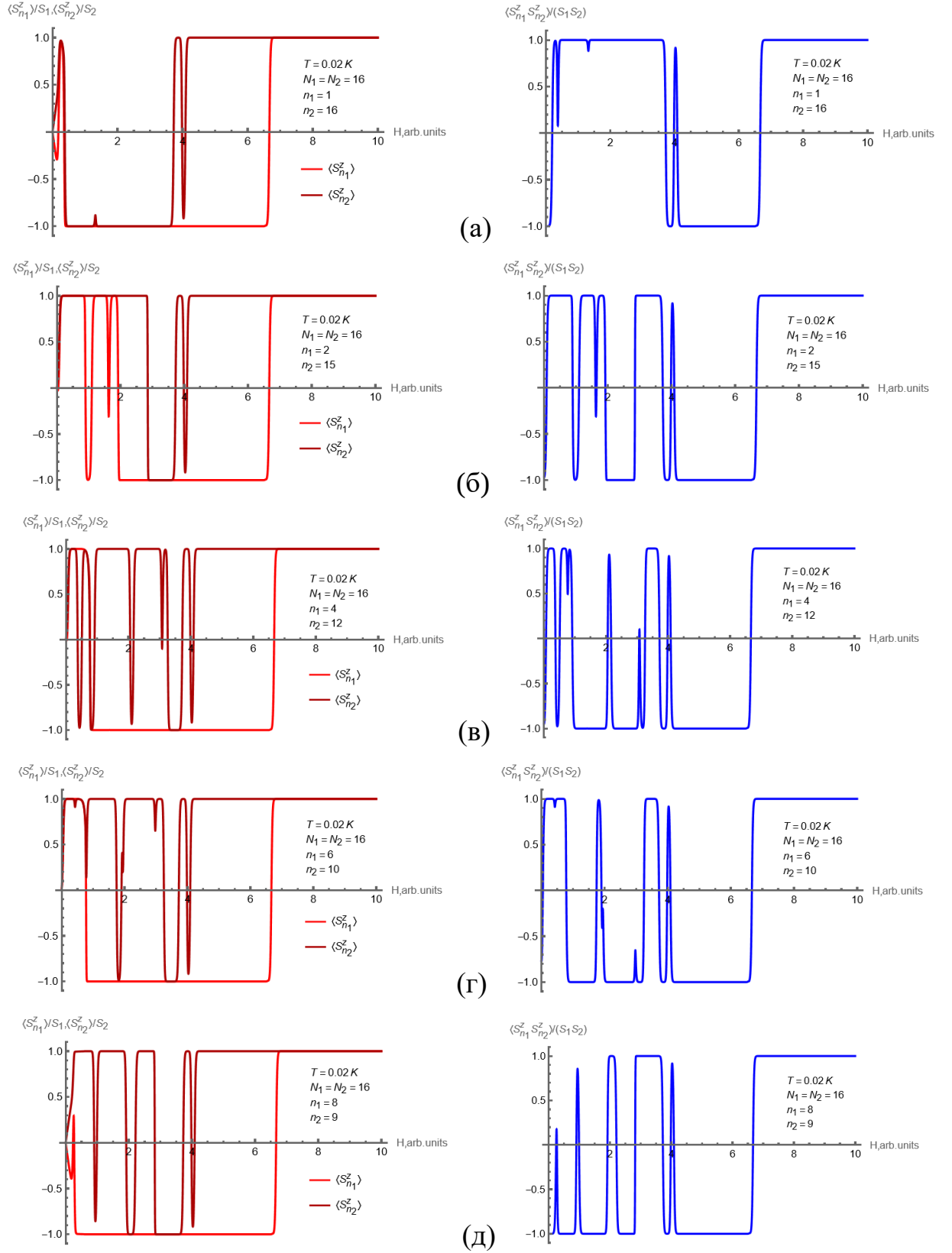


Рисунок 3.4 – Польові залежності $\langle S_{1,2}^z \rangle / S_{1,2}$ та $\langle S_1^z S_2^z \rangle / (S_1 S_2)$ при параметрах

$J_1 = 10K$; $J_2 = 20K$; $J'_1 = -8K$; $J'_2 = -6K$; $g_1 = g_2 = 3$; $g'_1 = 1.2$; $g'_2 = 1.3$; $S_1 = S_2 = \frac{1}{2}$ при

різних положеннях спінів-відростків

ВИСНОВКИ

Ми дослідили модель скінченного ХХ-ланцюжка, в якому на двох проміжних вузлах n_1, n_2 розташовані додаткові відростки – zz-спіни, які поєднані ХХ-ланцюжком довжини N_2 , попередньо розділивши її на такі моделі, як

- ХХ-ланцюжок із двома відростками на двох проміжних вузлах,
- скінченний ХХ-ланцюжок із двома домішками на кінцях.

Отримали такі результати:

- дисперсійні рівняння для знаходження спектрів стаціонарних станів розглянутої моделі;
- критичне значення довжини ланцюжка N_2 та критичне значення відстані між відростками, при яких від границь квазінеперервного спектру відщеплюються додаткові домішкові рівні;
- статистичні суми для кожного з двох «ефективних» ХХ-ланцюжків при фіксованих значеннях параметрів σ_1, σ_2 та підсумували їх для знаходження статсуми основної моделі;
- дослідили чисельно та графічно польову залежність намагніченості та довели існування стрибків у випадку антиферромагнітної взаємодії спінів-відростків;
- проілюстрували появу додаткових максимумів у температурній залежності теплоємності при збільшенні взаємодії відростків із ланцюжками;
- виконали чисельне моделювання польових залежностей z-проекцій спінів-відростків, яке допомогло виявити нестійку поведінку та зміну орієнтації z-проекцій кілька разів зі збільшенням поля; дослідили вплив відстані між домішковими відросткам на $\langle S_{1,2}^z \rangle / S_{1,2}$ та $\langle S_1^z S_2^z \rangle / (S_1 S_2)$.

Результати даного дослідження були обговорені на міжнародній науковій конференції IV International Conference "Condensed Matter & Low Temperature Physics". Результати були обговорені в рамках постерної сесії.

Тези були опубліковані в [15].

Назва доповіді:

On the Energy Spectrum and Magnetic Properties of low-dimensional spin systems of complex topology.

Автори:

K. S. Dzhenzherova, O. S. Dzhenzherov, E. V. Ezerskaya, V. O. Kovalenko.

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Zvyagin A.A. Finite Size Effects in Correlated Electron Models: Exact Results / A.A Zvyagin // Imperial College Press, London, & World Scientific, Singapore. – 2005. – P. 380.
2. Sutherland B. Beautiful Models. 70 Years of Exactly Solved Many-Body Problems / B. Sutherland // World Scientific Publishing, Singapore. – 2004. – P. 381.
3. Mattis D. The Theory of Magnetism Made Simple / D. Mattis // World Scientific Publishing. – 2006. – P. 580.
4. Fradkin E. Field theories of condensed matter physics / E. Fradkin. // Cambridge University Press. – 2013. – V. 2. – P. 838.
5. Heisenberg W. Zur Theorie des Ferromagnetismus / W. Heisenberg // Z.Physik. – 1928. – V. 49. – P. 619.
6. Dirac. P.A.M. Quantum Mechanics of Many-Electron Systems / P.A.M. Dirac // Proc. R. Soc. Lond. – 1929. – V.123. – P. 714-733.
7. Ising E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus / E. Ising // Z.Phys. – 1925. – V. 31. – P. 253 – 258.
8. Andrei N. Diagonalization of the Kondo Hamiltonian / N. Andrei // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 45. – P. 379.
9. Wiegmann P.B. Exact solution of the s-d exchange model (Kondo problem) / P.B. Wiegmann // J. Phys. C. – 1981. – V. 14. – P. 1463.
10. Lieb E. Two soluble models of an antiferromagnetic chain / E. Lieb, and T.D Schultz, and D.C. Mattis // Ann. Phys. (NY). – 1961. – V.16, №3. – P.407-466.
11. Kontorovich V.M. Magnetic properties of a spin array with two sublattices / V.M. Kontorovich and V.M. Tsukernik // Zh. Eksp. Teor. Fiz. – 1967. – V. 53, №9. – P. 1167-1176.
12. Kleiner V.Z. Paramagnetic resonance of an impurity atom in a one-dimensional spin system. / V.Z. Kleiner // Physics of Metals and Metallography. – 1975. – V. 5. – P. 947–952.

13. Artemov A.V. Low-temperature properties of finite XX-chains with an additional Ising spin / A.V. Artemov and E.V. Ezerskaya // Low Temperature Physics/Фізика низьких температур. – 2018. – V. 44. – P. 1645–1653.

14. Dzhenzherov O. Low Temperature Thermodynamics of the Finite Spin-1/2 XX Chain with Distortions / O. Dzhenzherov, E. Ezerskaya // Abstract book for 7th ICSM2021. – 2021. – P. 476.

15. Dzhenzherova K.S., Dzhenzherov O.S., Ezerskaya E.V. , Kovalenko V.O. / On the Energy Spectrum and Magnetic Properties of low-dimensional spin systems of complex topology // Condensed matter & low-temperature physic. Conference Program & Book of Abstracts. – 2024. – P. 145.