

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 імені академіка І.М.  
Ліфшиця

Голова ЕК \_\_\_\_\_

доц. Рашба Г. І. \_\_\_\_\_

“\_\_\_\_\_” червня 2024 р.

“\_\_\_\_\_” червня 2024 р.

Дженжерова Катерина Сергіївна

**Енергетичний спектр та термодинаміка  
мезоскопічних спінових кілець із точковим контактом**

Дипломна робота на здобуття  
освітньо-кваліфікаційного рівня  
“Бакалавр”

Науковий керівник —  
кандидат фіз.-мат. наук,  
доц. Єзерська О.В.

Рецензент —  
доктор фіз.-мат. наук,  
проф. Черановський В.О.

Харків 2024

## Анотація

Дженжерова К.С. Енергетичний спектр та термодинаміка мезоскопічних спінових кілець із точковим контактом. – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня “Балавр” за спеціальністю 104 — «фізика та астрономія». – Харків, 2024. – 42 с. – Іл. 18.

В роботі представлено знаходження аналітичних розрахунків для дисперсійного рівняння спектру стаціонарних станів двох  $XX$  ланцюжків зв'язаних через додатковий  $ZZ$ -спін. Досліджено термодинамічні характеристики спінового  $XX$ -ланцюжка без дрімшок та обраної моделі двох спінових кілець з спільним вузлом. Змодельовано польові та температурні залежності намагніченості та теплоємності для обох моделей.

Ключові слова: спін, спінове кільце, модель Ізінга,  $XX$ -ланцюжок,  $ZZ$ -спін, енергетичний спектр, термодинамічні характеристики.

## Abstract

K.S. Dzhenzherova Energy spectrum and thermodynamics of mesoscopic spin rings with point contact. – Manuscript.

Thesis for educational qualification for "Bachelor" degree, speciality 104 — "Physics and astronomy". - Kharkiv, 2024. - P. 42. - Fig. 18.

This work presents the analytical solution for the dispersion equation of the spectrum of stationary states of two  $XX$ –chains coupled through an additional  $ZZ$ –spin. The thermodynamic characteristics of a spin  $XX$ –chain without impurities and the chosen model of two spin rings with a common node are investigated. The field and temperature dependences of the magnetization and heat capacity for both models are modeled.

Keywords: spin, spin ring, Ising model,  $XX$ –chain,  $ZZ$ –spin, energy spectrum, thermodynamic characteristics.

## ЗМІСТ

ВСТУП .....	3
1 РОЗДІЛ СПІНОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ МАГНЕТИЗМУ .....	6
1.1 Одновимірні точно розв'язувані спінові моделі . .	6
1.1.1 Ізотропна модель. Метод Бете . . . . .	7
1.1.2 Модель з одновісною анізотропією . . . . .	8
1.1.3 Розв'язок Бекстера та квантовий метод оберненої задачі розсіювання для повністю анізотропної моделі . . . . .	8
1.1.4 Одновимірна модель Ізінга . . . . .	9
1.2 Одновимірна ХХ модель . . . . .	10
1.3 ХХ модель з різними домішками . . . . .	12
2 РОЗДІЛ 2 СТАЦІОНАРНІ СТАНИ СПІНОВОЇ МОДЕЛІ ДВОХ МЕЗОСКОПІЧНИХ СПІНОВИХ КІЛЕЦЬ ІЗ ТОЧКОВИМ КОНТАКТОМ .....	14
2.1 Модель з однаковими взаємодіями . . . . .	14
2.1.1 Діагоналізація гамільтоніану моделі . . . . .	15
2.1.2 Аналіз структури енергетичного спектру моделі	21
2.2 Модель з попарно рівними ізінгівськими взаємодіями	22
2.2.1 Діагоналізація узагальненого гамільтоніану .	23
2.3 Модель з різними обмінними ізінгівськими взаємодіями . . . . .	25
2.4 Знаходження розв'язків рівняння Шредінгера . .	27

	2
2.5 Аналіз умови появи локальних домішкових рівнів	29
3 РОЗДІЛ 3	
ТЕРМОДИНАМІКА МОДЕЛІ .....	33
3.1 Знаходження середнього значення $\langle \tilde{S}_0^z \rangle$ . . . . .	33
ВИСНОВКИ .....	40
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ .....	41

## ВСТУП

Одновимірні спінові моделі протягом кількох десятиліть є об'єктом постійної уваги фізиків-теоретиків. Такі моделі у фізиці конденсованого стану займають особливе місце. Тому є кілька причин: для таких моделей легше отримати точні розв'язки ніж для тривимірних відповідних моделей, і властивості низковимірних систем можуть сильно відрізнятися від тривимірних систем.

На початку 60-х років минулого століття експериментально були відкриті реальні магнітні сполуки, в яких магнітна підґратка є практично одновимірною чи двовимірною [1, 2, 3]. Це обумовлено тим, що обмінні взаємодії в одному чи у двох напрямках реального тривимірного кристала значно перевищують обмінну взаємодію в напрямках, що залишилися. Тривимірність проявляється тільки при дуже низьких температурах, коли суттєвою стає найбільш слабка обмінна взаємодія. Саме відкриття великої кількості реальних низковимірних магнітних сполук, а в останні роки мав місце великий прогрес нанотехнологій, надало подальшого імпульсу теоретичним дослідженням низковимірних систем. Вивчаються як лінійні ланцюжки, так і більш складні спінові системи – альтерновані ланцюжки, спінові драбини, що складаються з кількох ланцюжків, трикутні ланцюжки, "діамантові ланцюжки", декоровані спінові драбини [1]. Реальні магнетики завжди мають різні порушення періодичності кристалічної структури - домішкові атоми, вакансії, дислокації. Такі порушення ідеальної кристалічної структури можуть суттєво змінити фізичні властивості магнетика. Активно вивчається вплив

домішок різної природи на спектр магнітних збуджень та термодинаміку низьковимірних спінових моделей,

В дипломній роботі вивчається модельна спінова система, яка складається із двох скінченних  $XX$  ланцюжків зі спіном  $\frac{1}{2}$ . Ланцюжки замкнені в одва окремих кільця так, що зв'язок між ними здійснюється через додатковий ізінгівський спін ( $ZZ$ -спін) довільної величини в одній точці (точковий контакт). Вибір саме  $XX$  моделі та  $ZZ$ -взаємодії обумовлений тим, що завдяки такому вибору модель відноситься до класу точно розв'язуваних – для неї можна знайти точне дисперсійне рівняння для енергій всіх стаціонарних станів та розрахувати статистичну суму. Це дозволяє провести чисельне моделювання поведінки всіх термодинамічних характеристик: намагніченості, теплоємності, локальних середніх та парних кореляційних функцій.

*Метою* дипломної роботи є вивчення особливостей енергетичного спектру та термодинаміки квазіодновимірної спінової моделі складної топології. Нами були поставлені такі *завдання дослідження*:

- теоретично дослідити точний енергетичний спектр спінової системи, яка складається з двох скінченних  $XX$  ланцюжків, які утворюють два кільця через додатковий ізінгівський спін,
- вивести дисперсійне рівняння для стаціонарних станів з одним переверненим спіном та знайти умови появи локалізованих домішкових станів,
- розрахувати на основі отриманого спектру статистичну суму та основні термодинамічні величини
- чисельно промоделювати польові та температурні

залежності намагніченості та теплоємності, середнього значення проєкції додаткового спіну на вісь  $z$ . *Об'єктом дослідження* є спінові XX ланцюжки зі спіном  $1/2$ , що створюють два кільця через точковий контакт з ZZ-взаємодією.

*Предметом* є спектр одночастинкових стаціонарних станів та термодинамічні властивості точно розв'язуваної спінової системи.

*Практична цінність* результатів, пов'язана з тим, що отримані результати є точними. Їх можна використати для перевірки наближень, якими користуються теоретики для опису більш складних спінових систем.

*Достовірність* результатів роботи обумовлена використанням традиційних методів теоретичної фізики, таких як побудова спінових моделей на основі відомої моделі Гейзенберга з анізотропією обмінних взаємодій, перетворення Йордана–Вігнера, точне розв'язання рівняння Шредингера, обчислення статистичної суми та термодинамічних характеристик для ідеального газу безспінових ферміонів, чисельне моделювання за точними формулами.

## 1. РОЗДІЛ

### СПІНОВІ МОДЕЛІ КВАНТОВОЇ ТЕОРІЇ МАГНЕТИЗМУ

Спінові моделі широко використовуються для опису магнітних властивостей діелектриків [1], бо вони не враховують електричних струмів. Будуються ці моделі на основі припущення, що феро- та антиферомагнетизм діелектриків можна пов'язати зі спінами незаповнених внутрішніх оболонок хімічних елементів, таких як перехідні метали. Наведено основні результати теоретичних досліджень одновимірних спінових моделей.

#### 1.1. Одновимірні точно розв'язувані спінові моделі

Основною моделлю для магнітних діелектриків є модель Гейзенберга [2, 3, 4]. Для випадку спінового ланцюжка (одновимірна система) гамільтоніан повністю анізотропного ланцюжка [5] можна записати в наступному вигляді:

$$\mathbf{H} = -g\mu_B H \sum_{n=1}^N S_n^z - \sum_{n=1}^N (J_x S_n^x S_{n+1}^x + J_y S_n^y S_{n+1}^y + J_z S_n^z S_{n+1}^z). \quad (1.1)$$

Таку модель у сучасній науковій літературі називають XYZ моделлю. Тут наведений випадок ланцюжка, замкненого в кільце. Система має трансляційну симетрію. Вузол  $(N + 1)$  співпадає з вузлом 1.

### 1.1.1. Ізотропна модель. Метод Бете

В 1931 році Г. Бете [6] запропонував метод знаходження хвильової функції для моделі (сучасна назва ХХХ) з однаковими обмінними сталими при всіх проєкціях спінів  $J_x = J_y = J_z = J$ :

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

Анзац Бете, можна сказати, є твердженням, що у багаточастинковому стані хвильові функції залежать лише від фазових зсувів, які задаються як сума двочастинкових зсувів, тобто існують лише двочастинкові розв'язки.

Хвильова функція для  $r$ -магнона складається з  $r!$  членів ( $j < t$ ):

$$A_{n_1 n_2 \dots n_r} = \sum P_{k_1, k_2, \dots, k_r} e^{i(k_1 n_1 + \dots + k_r n_r + \frac{1}{2} \sum_j^r \sum_t^r \psi_{k_j, k_t})}$$

$A_{n_1 n_2 \dots n_r}$  складається з добутку  $r$  плоских хвиль, підсумованих за усіма можливими перестановками  $k$  з  $\psi$ , антисиметричними щодо їхніх індексів, які задовольняють рівнянням

$$2 \cot \frac{\psi_{k_j, k_t}}{2} = \cot \frac{k_j}{2} - \cot \frac{k_t}{2}; \quad k_j = \frac{2\pi p + \sum_1^r \psi_{k_j, k_t}}{N}$$

$$E = \sum_{i=1}^r \varepsilon_{k_i}; \quad E_{ground} = \sum_{i=1}^{N/2} \varepsilon_{k_i} = 2|J| \left( \frac{N}{4} - N \ln 2 \right).$$

### 1.1.2. Модель з одновісною анізотропією

На початку 60-х років метод Бете був застосований для моделі з одновісною анізотропією [7] (сучасна назва XXZ)  $J_x = J_y = J \neq J_z$ . Підставивши ці значення зв'язків до рівняння (1.1) отримаємо гамільтоніан для даної моделі:

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

Важливою спільною рисою двох моделей (XXX та XXZ) є зберігання Z-проекції повного спіну  $\sum_{n=1}^N S_n^z$  завдяки тому, що гамільтоніани цих моделей комутують з цією величиною. Стаціонарні стани можна класифікувати по значенням квантового числа — проекції повного спіна на вісь Z.

У випадку XYZ-моделі з тьома різними обмінними константами Z-проекція не зберігається, тому треба шукати іншу класифікацію стаціонарних станів.

### 1.1.3. Розв'язок Бекстера та квантовий метод оберненої задачі розсіювання для повністю анізотропної моделі

Метод Бете напряму не можна застосувати для повністю анізотропної моделі Гейзенберга. В 1972 році Бекстер [5] запропонував свій оригінальний метод для такої моделі. Цей

метод досить складний для розуміння й застосування. Через кілька років був запропонований аналог методу, який назвали "квантовий метод оберненої задачі розсіювання" або "алгебраїчний анзац Бете" (див., наприклад, [8]). Працюють ці методи тільки для випадку  $H = 0$ .

#### 1.1.4. Одновимірна модель Ізінга

Якщо покласти в рівняння (1.1)  $J_x = J_y = 0$  отримаємо гамільтоніан для моделі Ізінга [4] ( $J_z = J$ ):

$$\mathbf{H} = -g\mu_B H \sum_{n=1}^N S_n^z - J \sum_{n=1}^N S_n^z S_{n+1}^z$$

Ізінг запропонував використати для розрахунку статистичної суми заміненого ланцюжка метод трансфер-матриці, який дозволяє розбити гамільтоніан моделі на окремі доданки та шукати власні значення цих спрощених гамільтоніанів.

Виявилось, що в одновимірній моделі ізінга немає спонтанної намагніченості при  $T \neq 0$ . Ізінг зробив хибний висновок, що запропонована ним модель не може бути використана для опису феромагнетизму в разі будь-якої розмірності кристалічної ґратки. Феромагнетизм почали досліджувати за допомогою моделі, яка є дещо складнішою.

В 1944 році Онзагер провів дуже складні розрахунки [9] статистичної суми двовимірної прямокутної ґратки в моделі Ізінга зі спіном  $1/2$  та взаємодією найближчих сусідів за відсутності магнітного поля. Та довів існування критичної

температури переходу з феромагнітного в парамагнітний стан.

## 1.2. Одновимірна XX модель

Гамільтоніан одновимірної XX моделі має вигляд:

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

Вперше цю модель для опису магнітних властивостей спінового ланцюжка запропонували в роботі [10]. На прикладі XX-ланцюжка розглянемо метод Йордана-Вігнера [11] для переходу до фермі-операторів породження та знищення. Першим кроком, за допомогою рівнянь

$$\begin{cases} S_n^x = \frac{1}{2} (S_n^- + S_n^+) \\ S_n^y = \frac{i}{2} (S_n^- - S_n^+) \\ S_n^z = \frac{1}{2} - S_n^- S_n^+ \end{cases}$$

перепишемо гамільтоніан системи через сходинокві оператори  $S^+$  та  $S^-$  наступним чином:

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} - S_n^- S_n^+ \right) - J \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2} (S_n^+ S_{n+1}^- + S_n^- S_{n+1}^+). \quad (1.2)$$

Далі, знаючи, що сходинокві оператори  $S^+$  та  $S^-$  можна переписати через фермі-оператори  $a^\dagger$  та  $a$  за допомогою наступних рівнянь

$$S_n^+ = \prod_{l=1}^{n-1} (1 - 2a_l^\dagger a_l) a_n,$$

$$S_n^- = a_n^\dagger \prod_{l=1}^{n-1} (1 - 2a_l^\dagger a_l)$$

та знаючи властивості операторів породження та знищення, можемо записати наступні перетворення:

$$S_n^- S_n^+ = a_n^\dagger a_n$$

$$S_n^- S_{n+1}^+ = a_n^\dagger a_{n+1}$$

$$S_n^+ S_{n+1}^- = S_{n+1}^- S_n^+ = a_{n+1}^\dagger a_n.$$

З урахуванням цих перетворень, гамільтоніан (1.2) може бути переписаний через фермі-оператори породження та знищення наступним чинном:

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_{n=1}^N \left( \frac{1}{2} - a_n^\dagger a_n \right) - J \sum_{n=1}^{N-1} \frac{1}{2} \left( a_{n+1}^\dagger a_n + a_n^\dagger a_{n+1} \right).$$

Далі можна виконати перетворення Фур'є, яке діагоналізує гамільтоніан моделі, та побудувати її термодинаміку. Ми не будемо тут деталізувати опис цих перетворень, тому що в наступному розділі користуватимемося іншим методом діагоналізації.

### 1.3. XX модель з різними домішками

Багато уваги фізики-теоретики приділяють вивченню впливу різноманітних домішок на властивості реальних магнітних матеріалів, зокрема для XX моделі.

Наприклад, в роботі [12] досліджено енергетичний спектр та особливості польових і температурних залежностей основних термодинамічних характеристик скінченного XX-ланцюжка зі спіном  $1/2$ , замкненого одним ізінгівським зв'язком (1.3) і модель відкритого XX-ланцюжка з двома ZZ-домішками на обох кінцях (1.4).

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -g_0\mu_B H S_0^z - g\mu_B H \sum_{n=1}^N S_n^z - \\ & - J_0(S_1^z + S_N^z)S_0^z - J \sum_{n=1}^{N-1} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y). \end{aligned} \quad (1.3)$$

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -g_0\mu_B H \sigma_0^z - g_{N+1}\mu_B H \sigma_{N+1}^z - g\mu_B H \sum_{n=1}^N S_n^z \\ & - J \sum_{n=1}^{N-1} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) - J_0\sigma_0^z S_1^z - J_{N+1}\sigma_{N+1}^z S_N^z. \end{aligned} \quad (1.4)$$

Ця робота була присвячена теоретичному вивченню квантових стаціонарних станів і термодинаміки. Показано можливість появи локалізованих енергетичних рівнів біля домішкових спінів. Знайдено умови для формування локалізованих енергетичних рівнів, що виникають внаслідок сильної ізінгівської взаємодії між домішковими спінами та XX-ланцюжком. Досліджені основні термодинамічні

характеристики в залежності від поля та температури.

Роботу [13] присвячено теоретичному вивченню квантових стаціонарних станів та термодинаміки двох точно розв'язуваних квантових моделей: скінченного ХХ-ланцюжка з «відростком», зв'язаним ZZ-взаємодією (ізінговською) з одним з вузлів ланцюжка, та двох різних скінченних ХХ-ланцюжків, які з'єднані через додатковий ZZ-спін. Показано, що в спектрі можуть існувати поблизу домішкового спіна локалізовані домішкові рівні, знайдено умови їх появи. Досліджено польові та температурні залежності основних термодинамічних характеристик моделей.

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -g\mu_B H \sum_{n=1; n \neq n_0}^N S_{1n}^z - g'\mu_B H S_{1,n_0}^z - \\
&- J \sum_{n=1; n \neq n_0-1, n_0}^{N-1} (S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y) - \\
&- J'(S_{1,n_0-1}^x S_{1,n_0}^x + S_{1,n_0-1}^y S_{1,n_0}^y + S_{1,n_0}^x S_{1,n_0+1}^x + S_{1,n_0}^y S_{1,n_0+1}^y) - \\
&- g_0\mu_B H S_0^z - J_0 S_{1,n_0}^z S_0^z. \\
\hat{H} &= -g\mu_B H \sum_{n=1; n \neq n_0}^N S_{1,n}^z - g'\mu_B H S_{1,n_0}^z - \\
&- J \sum_{n=1; n \neq n_0-1, n_0}^{N-1} (S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y) - \\
&- J'(S_{1,n_0-1}^x S_{1,n_0}^x + S_{1,n_0-1}^y S_{1,n_0}^y + S_{1,n_0}^x S_{1,n_0+1}^x + S_{1,n_0}^y S_{1,n_0+1}^y) - \\
&- g_0\mu_B H S_0^z - J_0 S_{1,n_0}^z S_0^z.
\end{aligned}$$

В наступному розділі буде запропоновано узагальнення моделей з роботи [12].

## 2. РОЗДІЛ 2

### СТАЦІОНАРНІ СТАНИ СПІНОВОЇ МОДЕЛІ ДВОХ МЕЗОСКОПІЧНИХ СПІНОВИХ КІЛЕЦЬ ІЗ ТОЧКОВИМ КОНТАКТОМ

В цьому розділі ми розглянемо спектр стаціонарних станів спінової низьковимірної моделі, яка складається із двох скінчених ХХ-ланцюжків, пов'язаних в одній точці через домішковий ізінгівський спін довільної величини  $S$  (наприклад, див. рис. 2.1).

#### 2.1. Модель з однаковими взаємодіями

Спочатку будемо вважати, що всі взаємодії спіну  $\tilde{S}_0^z$  з «найближчими сусідами» на обох ХХ-ланцюжках є однаковими  $J_{01} = J_{02} = J_0$ .

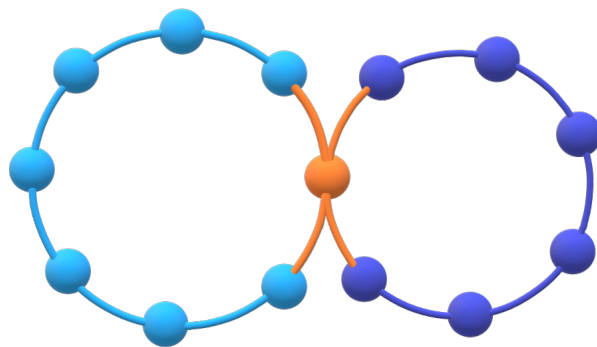


Рис. 2.1. Схематичне зображення моделі при  $J_{01} = J_{02}$

Гамільтоніан такої моделі має такий вигляд:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - \\
& - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - \\
& - g_0\mu_B H \tilde{S}_0^z - J_0 \tilde{S}_0^z \left( S_{1,1}^z + S_{1,N_1}^z + S_{2,1}^z + S_{2,N_2}^z \right),
\end{aligned} \tag{2.1}$$

де

$g$  —  $g$ -фактор,

$\mu_B$  — магнетон Бора,

$H$  — зовнішнє магнітне поле,

$J_1$  — обмінна взаємодія між сусідніми спінами у першому ланцюгу,

$S_{1,n}^i, S_{1,n+1}^i$  —  $i$ -компоненти операторів спінів для  $n$ -го і  $(n+1)$ -го спінів у першому ланцюгу,

$J_2$  — обмінна взаємодія між сусідніми спінами у другому ланцюгу,

$S_{2,n}^i, S_{2,n+1}^i$  —  $i$ -компоненти операторів спінів для  $n$ -го і  $(n+1)$ -го спінів у другому ланцюгу,

$\tilde{S}_0^z$  —  $z$ -компонента оператора ізолюваного спіну,

$J_0$  — взаємодія між ізолюваним спіном  $\tilde{S}_0^z$  та крайніми спінами обох ланцюгів.

### 2.1.1. Діагоналізація гамільтоніану моделі

Запропонована модель відноситься до класу точно розв'язуваних. Її гамільтоніан можна діагоналізувати та знайти таким чином енергії та хвильові функції всіх стаціонарних станів.

Для діагоналізації гамільтоніану введемо сходинкові оператори  $S^\pm$  для обох ланцюжків:

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

Далі скористаємось перетворенням Іордана–Вігнера [11] та перейдемо від спінових операторів до фермі-операторів породження та знищення. Звернемо увагу на те, що в даному випадку треба узагальнити формули перетворення так само, як це було зроблено в роботі [14].

$$\begin{aligned} S_{1,n}^+ &= \prod_{m<n} \sigma_{1,m} \sigma_{2,m} a_{1,n}; & S_{2,n}^+ &= \prod_{m<n} \sigma_{1,m} \sigma_{2,m} \sigma_{1,n} a_{2,n}; \\ S_{1,n}^- &= \prod_{m<n} \sigma_{1,m} \sigma_{2,m} a_{1,n}^\dagger; & S_{2,n}^- &= \prod_{m<n} \sigma_{1,m} \sigma_{2,m} \sigma_{1,n} a_{2,n}^\dagger, \end{aligned}$$

де

$$\begin{aligned} \sigma_{i,m} &= 1 - a_{i,m}^\dagger a_{i,m}; & [a_{i,m}^\dagger, a_{i',m'}^\dagger] &= 0; \\ [a_{i,m}, a_{i',m'}] &= 0; & [a_{i,m}, a_{i',m'}^\dagger] &= \delta_{i,i'} \delta_{m,m'}. \end{aligned}$$

В результаті перетворення гамільтоніан (2.1) набуває вигляду:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left( \frac{1}{2} - a_{1,n}^\dagger a_{1,n} \right) - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} + a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} \right) - \\
& - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left( \frac{1}{2} - a_{2,n}^\dagger a_{2,n} \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} + a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} \right) - \\
& - g_0\mu_B H \sigma_0 - J_0\sigma_0 \left( 2 - a_{1,1}^\dagger a_{1,1} - a_{1,N_1}^\dagger a_{1,N_1} - a_{2,1}^\dagger a_{2,1} - a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right).
\end{aligned}$$

Після деяких математичних перетворень остаточно маємо:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} = & E_0 + (g_1\mu_B H + J_0\sigma_0) \left( a_{1,1}^\dagger a_{1,1} + a_{1,N_1}^\dagger a_{1,N_1} \right) + \\
& + (g_2\mu_B H + J_0\sigma_0) \left( a_{2,1}^\dagger a_{2,1} + a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right) + \\
& + g_1\mu_B H \sum_{n=2}^{N_1-1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) + \quad (2.2) \\
& + g_2\mu_B H \sum_{n=2}^{N_2-1} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right);
\end{aligned}$$

Отриманий гамільтоніан (2.2) є квадратичним по операторах породження-знищення.

$$E_0 = -\frac{1}{2} [2(g_0\mu_B H + 2J_0)\sigma_0 + g_1\mu_B H N_1 + g_2\mu_B H N_2].$$

Стан без «збуджень», тобто «умовний вакуум»,  $|0\rangle$  визначаємо так:

$$a_{i,n}|0\rangle = 0, \quad i = 1, 2; \quad n = 1, \dots, N_{1,2}.$$

Рівняння Шредінгера для цього стану має тривіальний розв'язок

$$\hat{\mathbf{H}}|0\rangle = E_0|0\rangle.$$

Існує безліч способів для діагоналізації гамільтоніана. Ми ж скористаємося знаходженням розв'язку одночастинкового рівняння Шредінгера, яке дає можливість знаходження всіх енергій станів із одним «перевернутим» спіном. Оскільки гамільтоніан (2.2) є квадратичним по фермі-операторах, з цих одночастинкових станів складається повний спектр з урахуванням принципу Паулі.

Вектор стану з одним перевернутим спіном задовольняє рівнянню:

$$\hat{\mathbf{H}}|1\rangle = (E_0 + \varepsilon)|1\rangle,$$

де

$$|1\rangle = \sum_{n=1}^{N_1} U_{1,n} a_{1,n}^\dagger |0\rangle + \sum_{n=2}^{N_2} U_{2,n} a_{2,n}^\dagger |0\rangle. \quad (2.3)$$

Рівняння для хвильової функції отримуємо, подіавши (2.3) на (2.2). В результаті маємо таку систему рівнянь у скінчених різницях для обох ХХ ланцюжків.

$$(\varepsilon - g_i \mu_B H) U_{i,n} + \frac{J_i}{2} (U_{i,n+1} + U_{i,n-1}) = 0; \quad n = 2, 3, \dots, N_i - 1;$$

$$\begin{cases} (\varepsilon - g_i \mu_B H - J_0 \sigma_0) U_{i,1} + \frac{J_i}{2} U_{i,2} = 0; \\ (\varepsilon - g_i \mu_B H - J_0 \sigma_0) U_{i,N_i} + \frac{J_i}{2} U_{i,N_i-1} = 0; \end{cases}$$

Ці рівняння можна розглядати окремо для кожного ланцюжка. Наприклад, для першого ланцюжка  $i = 1$  це буде основне рівняння

$$(\varepsilon - g_1 \mu_B H) U_{1,n} + \frac{J_1}{2} (U_{1,n+1} + U_{1,n-1}) = 0, \quad n = 2, 3, \dots, N_1 - 1$$

із двома граничними умовами на обох кінцях ланцюжка

$$\begin{cases} (\varepsilon - g_1 \mu_B H - J_0 \sigma_0) U_{1,1} + \frac{J_1}{2} U_{1,2} = 0; \\ (\varepsilon - g_1 \mu_B H - J_0 \sigma_0) U_{1,N_1} + \frac{J_1}{2} U_{1,N_1-1} = 0; \end{cases}$$

Частинний розв'язок шукаємо у вигляді  $x_1^n$ . Підставляємо його в основне рівняння та отримуємо:

$$\varepsilon_1 = g_1 \mu_B H - \frac{J_1}{2} \left( x_1 + \frac{1}{x_1} \right).$$

Загальний розв'язок має вигляд:

$$U_{1,n} = A_1 x_1^n + B_1 x_1^{-n}.$$

Підставимо його в граничні умови:

$$\begin{cases} (\varepsilon - g_1 \mu_B H - J_0 \sigma_0) U_1 + \frac{J_1}{2} U_2 = 0; \\ (\varepsilon - g_1 \mu_B H - J_0 \sigma_0) U_{N_1} + \frac{J_1}{2} U_{N_1-1} = 0; \\ \frac{J_1}{2} (A_1 x_1^2 + B_1 x_1^{-2}) - \left( \frac{J_1}{2} (x_1 + \frac{1}{x_1}) + J_0 \sigma_0 \right) (A_1 x_1^1 + B_1 x_1^{-1}) = 0; \\ \frac{J_1}{2} (A_1 x_1^{N_1-1} + B_1 x_1^{1-N_1}) - \\ - \left( \frac{J_1}{2} (x_1 + \frac{1}{x_1}) + J_0 \sigma_0 \right) (A_1 x_1^{N_1} + B_1 x_1^{-N_1}) = 0; \\ (\alpha_1 x_1 + 1) A_1 + \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right) B_1 = 0; \\ \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right) x_1^{(N_1+1)} A_1 + (\alpha_1 x_1 + 1) x_1^{-(N_1+1)} B_1 = 0; \\ \alpha_1 = \frac{2J_0 \sigma_0}{J_1}. \end{cases}$$

Ці граничні умови є системою двох лінійних однорідних алгебраїчних рівнянь зі сталими коефіцієнтами  $A_1$  та  $B_1$ . Така система має нетривіальні розв'язки за умови, що її визначник дорівнює нулю.

$$\begin{aligned} (\alpha_1 x_1 + 1)^2 x_1^{-(N_1+1)} + \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right)^2 x_1^{(N_1+1)} &= 0; \\ (\alpha_1 x_1 + 1)^2 + \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right)^2 x_1^{2(N_1+1)} &= 0; \end{aligned}$$

Зручно розбити розв'язки цього рівняння на два окремі випадки:

$$\begin{aligned}
(-) \quad & \alpha_1 x_1 \left(1 - x_1^{(N_1-1)}\right) + \left(1 - x_1^{(N_1+1)}\right) = 0; \\
(+) \quad & \alpha_1 x_1 \left(1 + x_1^{(N_1-1)}\right) + \left(1 + x_1^{(N_1+1)}\right) = 0.
\end{aligned} \tag{2.4}$$

### 2.1.2. Аналіз структури енергетичного спектру моделі

Розглянемо граничний випадок нескінченної кількості спінів в ланцюжку номер один та проаналізуємо можливість існування локалізованих поблизу кінців ланцюжка так званих зв'язаних станів.

$$|x_1| < 1; \quad N_1 \rightarrow \infty, \quad \alpha_1 x_1 = -1; \quad x_1 = -\frac{1}{\alpha_1}; \quad |\alpha_1| > 1. \tag{2.5}$$

Умови існування локалізованих (зв'язаних) станів для скінченного ланцюжка знаходимо підставляючи умови (2.5) в рівняння (2.4):

$$(-) \quad x_1 \rightarrow +1, \quad \alpha_1 = - \lim_{x \rightarrow +1-0} \frac{1 - x_1^{(N_1+1)}}{x_1 \left(1 - x_1^{(N_1+1)}\right)} = -\frac{N_1 + 1}{N_1 - 1}.$$

Умови появи зв'язаних станів на першому ланцюжку є такими:

$$(-) \quad \alpha_1 < -\frac{N_1 + 1}{N_1 - 1};$$

$$(+) \quad \alpha_1 < -1.$$

Розгляд другого ланцюжка є абсолютно аналогічним, тому наводити ці розрахунки ще раз ми не будемо. Лише наведемо остаточні результати одразу для обох ланцюжків.

Дисперсійні рівняння:

$$(-) \quad \alpha_i x_i \left(1 - x_i^{(N_i-1)}\right) + \left(1 - x_i^{(N_i+1)}\right) = 0,$$

$$(+) \quad \alpha_i x_i \left(1 + x_i^{(N_i-1)}\right) + \left(1 + x_i^{(N_i+1)}\right) = 0.$$

Енергії:

$$\varepsilon_i = g_i \mu_B H - \frac{J_i}{2} \left( x_i + \frac{1}{x_i} \right).$$

Умови існування локальних рівнів (зв'язаних станів):

$$(-) \quad \alpha_i < -\frac{N_i + 1}{N_i - 1},$$

$$(+) \quad \alpha_i < -1.$$

## 2.2. Модель з попарно рівними ізінгівськими взаємодіями

Розглянемо більш загальний випадок моделі двох спінових кілець із точковим контактом. Нехай тепер  $J_{01} \neq J_{02}$ .

Тоді гамільтоніан (2.1) набуває вигляду:

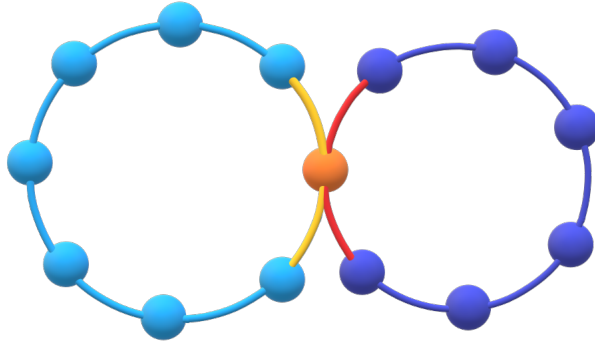


Рис. 2.2. Схематичне зображення моделі при  $J_{01} \neq J_{02}$

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{H}} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - \\
 & - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - \\
 & - g_0\mu_B H \tilde{S}_0^z - \left[ J_{01} \left( S_{1,1}^z + S_{1,N_1}^z \right) + J_{02} \left( S_{2,1}^z + S_{2,N_2}^z \right) \right] \tilde{S}_0^z.
 \end{aligned} \tag{2.6}$$

### 2.2.1. Діагоналізація узагальненого гамільтоніану

Нам необхідно повторити перехід Йордана-Вігнера для гамільтоніану (2.6). Запишемо гамільтоніан узагальненої моделі через фермі-оператори:

$$\begin{aligned}
 \hat{\mathbf{H}} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left( \frac{1}{2} - a_{1,n}^\dagger a_{1,n} \right) - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} + a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} \right) - \\
 & - g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left( \frac{1}{2} - a_{2,n}^\dagger a_{2,n} \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} + a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} \right) - \\
 & - g_0\mu_B H \sigma_0 - \\
 & - \sigma_0 \left[ J_{01} \left( 1 - a_{1,1}^\dagger a_{1,1} - a_{1,N_1}^\dagger a_{1,N_1} \right) + J_{02} \left( 1 - a_{2,1}^\dagger a_{2,1} - a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right) \right].
 \end{aligned}$$

Перепишемо цей гамільтоніан ще раз:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} &= E_0 + (g_1\mu_B H + J_{01}\sigma_0) \left( a_{1,1}^\dagger a_{1,1} + a_{1,N_1}^\dagger a_{1,N_1} \right) + \\
&+ (g_2\mu_B H + J_{02}\sigma_0) \left( a_{2,1}^\dagger a_{2,1} + a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right) + \\
&+ g_1\mu_B H \sum_{n=2}^{N_1-1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) + \\
&+ g_2\mu_B H \sum_{n=2}^{N_2-1} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right); \\
E_0 &= -\frac{1}{2} [2(g_0\mu_B H + J_{01} + J_{02})\sigma_0 + g_1\mu_B H N_1 + g_2\mu_B H N_2].
\end{aligned}$$

Рівняння хвильових функцій матимуть вигляд:

$$\begin{aligned}
(\varepsilon - g_1\mu_B H) U_{1,n} + \frac{J_1}{2} (U_{1,n+1} + U_{1,n-1}) &= 0; \quad n = 2, 3, \dots, N_1 - 1; \\
\left\{ \begin{aligned}
(\varepsilon - g_1\mu_B H - J_{01}\sigma_0) U_{1,1} + \frac{J_1}{2} U_{1,2} &= 0; \\
(\varepsilon - g_1\mu_B H - J_{01}\sigma_0) U_{1,N_1} + \frac{J_1}{2} U_{1,N_1-1} &= 0;
\end{aligned} \right. \\
(\varepsilon - g_2\mu_B H) U_{2,n} + \frac{J_2}{2} (U_{2,n+1} + U_{2,n-1}) &= 0; \quad n = 2, 3, \dots, N_2 - 1; \\
\left\{ \begin{aligned}
(\varepsilon - g_2\mu_B H - J_{02}\sigma_0) U_{2,1} + \frac{J_2}{2} U_{2,2} &= 0; \\
(\varepsilon - g_2\mu_B H - J_{02}\sigma_0) U_{2,N_2} + \frac{J_2}{2} U_{2,N_2-1} &= 0.
\end{aligned} \right.
\end{aligned}$$

Відповідні розв'язки отримуємо так само, як для спрощеного випадку, що був розглянутий вище.

$$(\alpha_1 x_1 + 1)^2 + \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right)^2 x_1^{2(N_1+1)} = 0; \quad \alpha_1 = \frac{2J_{01}\sigma_0}{J_1};$$

$$\begin{aligned}
& (\alpha_2 x_2 + 1)^2 + \left( \frac{\alpha_2}{x_2} + 1 \right)^2 x_2^{2(N_2+1)} = 0; \quad \alpha_2 = \frac{2J_{02}\sigma_0}{J_2}; \\
& \begin{cases} (\alpha_1 x_1 + 1) A_1 + \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right) B_1 = 0; \\ \left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right) x_1^{(N_1+1)} A_1 + (\alpha_1 x_1 + 1) x_1^{-(N_1+1)} B_1 = 0; \end{cases} \\
& B_1 = -\frac{(\alpha_1 x_1 + 1)}{\left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right)} A_1 = -\frac{\left( \frac{\alpha_1}{x_1} + 1 \right) x_1^{2(N_1+1)}}{(\alpha_1 x_1 + 1)} A_1.
\end{aligned}$$

### 2.3. Модель з різними обмінними ізінгівськими взаємодіями

Розглянемо випадок, коли  $J_{01} \neq J'_{01} \neq J_{02} \neq J'_{02}$ .

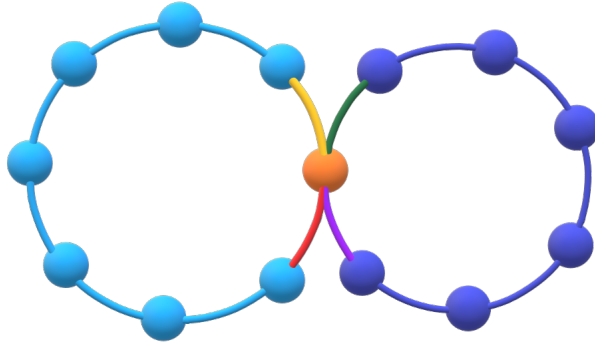


Рис. 2.3. Схематичне зображення моделі з  $J_{01} \neq J'_{01} \neq J_{02} \neq J'_{02}$

Наведемо гамільтоніан такої моделі:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} = & -g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y \right) - \\
& - g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y \right) - \\
& - g_0 \mu_B H \tilde{S}_0^z - \left[ J_{01} S_{1,1}^z + J'_{01} S_{1,N_1}^z + J_{02} S_{2,1}^z + J'_{02} S_{2,N_2}^z \right] \tilde{S}_0^z.
\end{aligned}$$

Аналогічно до попередніх моделей запишемо цей

гамільтоніан через фермі-оператори породження та знищення:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left( \frac{1}{2} - a_{1,n}^\dagger a_{1,n} \right) - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} + a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} \right) - \\
& -g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left( \frac{1}{2} - a_{2,n}^\dagger a_{2,n} \right) - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} + a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} \right) - \\
& -g_0\mu_B H \sigma_0 - \sigma_0 J_{01} \left( \frac{1}{2} - a_{1,1}^\dagger a_{1,1} \right) - \sigma_0 J'_{01} \left( \frac{1}{2} - a_{1,N_1}^\dagger a_{1,N_1} \right) - \\
& -\sigma_0 J_{02} \left( \frac{1}{2} - a_{2,1}^\dagger a_{2,1} \right) - \sigma_0 J'_{02} \left( \frac{1}{2} - a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} \right).
\end{aligned}$$

А далі перепишемо отримане рівняння у вигляді:

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbf{H}} = & E_0 + (g_1\mu_B H + J_{01}\sigma_0) a_{1,1}^\dagger a_{1,1} + (g_1\mu_B H + J'_{01}\sigma_0) a_{1,N_1}^\dagger a_{1,N_1} + \\
& + (g_2\mu_B H + J_{02}\sigma_0) a_{2,1}^\dagger a_{2,1} + (g_2\mu_B H + J'_{02}\sigma_0) a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2} + \\
& + g_1\mu_B H \sum_{n=2}^{N_1-1} a_{1,n}^\dagger a_{1,n} - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N_1-1} \left( a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} \right) + \\
& + g_2\mu_B H \sum_{n=2}^{N_2-1} a_{2,n}^\dagger a_{2,n} - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N_2-1} \left( a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} \right),
\end{aligned}$$

$$E_0 = -\frac{1}{2} [(2g_0\mu_B H + J_{01} + J'_{01} + J_{02} + J'_{02}) \sigma_0 + \mu_B H (g_1 N_1 + g_2 N_2)].$$

Гамільтоніан досліджуваної моделі фактично розділений на два гамільтоніани ХХ-ланцюжків з домішками на обох кінцях.

$$\begin{aligned} \hat{\mathbf{H}} = & E_{i,0} + (g_i\mu_B H + J_{0i}\sigma_0) a_{i,1}^\dagger a_{i,1} + (g_i\mu_B H + J'_{0i}\sigma_0) a_{i,N_i}^\dagger a_{i,N_i} + \\ & + g_i\mu_B H \sum_{n=2}^{N_i-1} a_{i,n}^\dagger a_{i,n} - \frac{J_i}{2} \sum_{n=1}^{N_i-1} \left( a_{i,n}^\dagger a_{i,n+1} + a_{i,n+1}^\dagger a_{i,n} \right). \end{aligned} \quad (2.7)$$

#### 2.4. Знаходження розв'язків рівняння Шредінгера

Для скінченного ХХ-ланцюжка, в якому кінцеві спіни знаходяться в ефективному магнітному полі, гамільтоніан досліджуваної моделі визначається формулою (2.7). Розв'язки одночастинкового рівняння Шредінгера

$$\hat{\mathbf{H}}_i |1\rangle = (E_{i,ferro} + \varepsilon) |1\rangle$$

слід знаходити наступним чином

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

Цей розв'язок є вектором стаціонарного стану з одним перевернутим спіном. Коефіцієнти  $A_m$  — це хвильова функція в "координатному зображенні". Роль координат відіграють номери вузлів  $m$ .

Основне рівняння (2.8) є рівнянням у скінченних різницях, так само, як і відповідні граничні умови (2.9).

$$(\varepsilon - g_i \mu H) A_m + \frac{J_i}{2} (A_{m-1} + A_{m+1}) = 0; \quad 2 < n < N_i; \quad (2.8)$$

$$\begin{aligned} (\varepsilon - g_i \mu_B H - J_{0i} \sigma_0) A_1 + \frac{J_i}{2} A_2 &= 0; \\ (\varepsilon - g'_i \mu_B H - J'_{0i} \sigma_0) A_{N_i} + \frac{J_i}{2} A_{N_i-1} &= 0; \end{aligned} \quad (2.9)$$

Розв'язок рівняння (2.8) шукаємо у вигляді  $x^m$ . Маємо такий вираз для енергії через параметр  $x$ :

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

Загальний розв'язок, який шукаємо у вигляді:

$$A_m = C_1 x^m + C_2 x^{-m}, \quad 1 \leq n \leq N_i,$$

підставимо в граничні рівняння (2.9). Отримаємо:

$$(\alpha_i x - 1) C_1 + \left( \frac{\alpha_i}{x} - 1 \right) C_2 = 0; \quad (2.10)$$

$$\left( \frac{\alpha'_i}{x} - 1 \right) x^{N_i+1} C_1 + (\alpha'_i x - 1) x^{-(N_i+1)} C_2 = 0. \quad (2.11)$$

Тут

$$\alpha_i = \frac{2J_{0i}\sigma_0}{J_i}; \quad \alpha'_i = \frac{2J'_{0i}\sigma_0}{J_i}.$$

Нетривіальні розв'язки така система двох однорідних рівнянь має тільки у випадку, коли її визначник дорівнює нулю. Ця умова дає змогу знайти дисперсійні рівняння для знаходження рівнів енергії.

Для найбільш анізотропного випадку дисперсійні рівняння мають вигляд:

$$(\alpha_i x - 1)(\alpha'_i x - 1) - \left(\frac{\alpha_i}{x} - 1\right)\left(\frac{\alpha'_i}{x} - 1\right)x^{2(N_i+1)} = 0, \quad i = 1, 2. \quad (2.12)$$

### 2.5. Аналіз умови появи локальних домішкових рівнів

Для кращого розуміння термодинамічних властивостей та чисельного моделювання цих величин варто проаналізувати умови появи зв'язаних домішкових станів, які можуть відщеплюватись від обох границь зон квазінеперервного спектру. Зв'язаним станам відповідають дійсні розв'язки дисперсійного рівняння (2.12)  $|x| \leq 1$ . Почнемо аналіз зі спрощеного випадку  $N_i \rightarrow \infty$ , коли за умови  $|x| < 1$

$$x^{2(N_i+1)} \rightarrow 0,$$

$$(\alpha_i x - 1)(\alpha'_i x - 1) - \left(\frac{\alpha_i}{x} - 1\right) \left(\frac{\alpha'_i}{x} - 1\right) \underbrace{x^{2(N_i+1)}}_{\rightarrow 0} = 0,$$

$$(\alpha_i x - 1)(\alpha'_i x - 1) = 0.$$

Отримуємо два простих розв'язки:

$$x_i^{(1)} = \frac{1}{\alpha_i}; \quad x_i^{(2)} = \frac{1}{\alpha'_i}.$$

Ці розв'язки будуть задовольняти умові  $|x| \leq 1$ , якщо

$$|\alpha_i| \geq 1; \quad |\alpha'_i| \geq 1.$$

Таким чином, для появи локалізованих поблизу ізінгівського спіну станів потрібний достатньо сильний зв'язок цього спіну з ХХ ланцюжками. Тепер можемо перейти до аналізу умов появи зв'язаних станів в загальному випадку ланцюжків довільної, але скінченної, довжини. Дисперсійне рівняння має додаткові «нефізичні» розв'язки, які треба відкинути. Зробимо це таким чином. Скористаємось правилом Лопіталя для знаходження границі  $x \rightarrow \pm 1 - 0$ :

$$\begin{aligned}
& \alpha_i \alpha'_i x^2 \left(1 - x^{2(N_i-1)}\right) - (\alpha_i + \alpha'_i) x \left(1 - x^{2N_i}\right) + \left(1 - x^{2(N_i+1)}\right) = 0; \\
& \alpha_i \alpha'_i \left(1 - x^{2(N_i-1)}\right) \mp (\alpha_i + \alpha'_i) x \left(1 - x^{2N_i}\right) + \left(1 - x^{2(N_i+1)}\right) = 0; \\
& \frac{d}{dx} \left[ \alpha_i \alpha'_i \left(1 - x^{2(N_i-1)}\right) \mp (\alpha_i + \alpha'_i) x \left(1 - x^{2N_i}\right) + \right. \\
& \quad \left. + \left(1 - x^{2(N_i+1)}\right) \right]_{x \rightarrow \pm 1-0} = 0; \\
& \alpha_i \alpha'_i (N_i - 1) \mp (\alpha_i + \alpha'_i) N_i + (N_i - 1) = 0.
\end{aligned}$$

Отримали критичне значення довжини ланцюжків:

$$N_i = \left| \frac{\alpha_i \alpha'_i - 1}{(\alpha_i - 1)(\alpha'_i - 1)} \right|.$$

На рис. 2.4 та рис. 2.5 зобразимо структури спектрів стаціонарних станів за різних комбінацій обмінних взаємодій, при цьому для обох зображень маємо однакові значення  $S = \frac{1}{2}$ ,  $g_0 = 1.3$ ,  $g_1 = 1$ ,  $g_2 = 2$ ,  $\mu_B = 1$ ,  $H = 0$ ,  $N_1 = 16$ ,  $N_2 = 10$ .

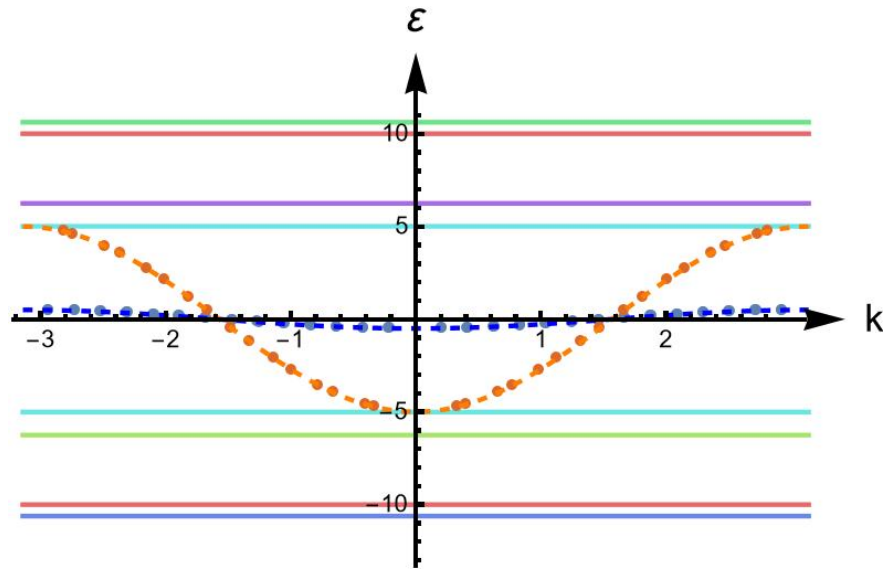


Рис. 2.4. Спектр стаціонарних станів з одним перевернутим спіном  $J_1 = 0.5$ ,  $J_2 = 5$ ,  $J_{01} = J'_{01} = 10$ ,  $J_{02} = J'_{02} = 20$

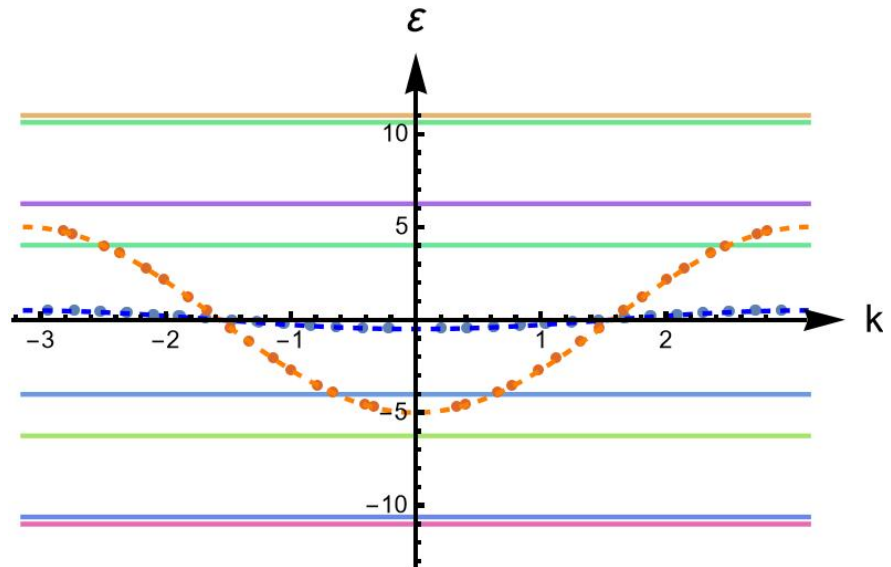


Рис. 2.5. Спектр стаціонарних станів з одним перевернутим спіном  $J_1 = 0.5$ ,  $J_2 = 5$ ,  $J_{01} = 8$ ,  $J_{02} = 22$ ,  $J'_{01} = 10$ ,  $J'_{02} = 20$

### 3. РОЗДІЛ 3 ТЕРМОДИНАМІКА МОДЕЛІ

#### 3.1. Знаходження середнього значення $\langle \tilde{S}_0^z \rangle$

Досліджувана модель зведена нами до ідеального газу ферміонів. Визначимо статистичну суму моделі. Як відомо, статистичний оператор визначається формулою, до якої входить статистична сума  $Z$ .

$$\hat{\rho} = \frac{1}{Z} e^{-\frac{\hat{H}}{T}}$$

Нам треба знайти "слід" від  $Z = \text{Tr} \left( \exp \left[ -\frac{\hat{H}}{T} \right] \right)$ .

Ми маємо додаткове квантове число  $\sigma_0$ , тому повна статсума буде сумою по всім можливим значенням  $\sigma_0 = -S, \dots, S$ :

$$Z = \sum_{\sigma_0=-S}^S Z(\sigma_0). \quad (3.1)$$

Статсума кожного з ХХ ланцюжків при фіксованому значенні  $\sigma_0$  визначається стандартною формулою:

$$Z(\sigma_0) = \exp \left[ -\frac{E_{0,i}(\sigma_0)}{T} \right] \prod_{\lambda_i} \left( 1 + \exp \left[ \frac{\varepsilon_{\lambda_i}(\sigma_0)}{T} \right] \right).$$

Добуток (3.1) береться по всіх можливих значеннях параметру  $x$ , тобто по всіх розв'язках дисперсійних рівнянь.

Основні термодинамічні величини можна знайти за допомогою статсуми (3.1) за відомими формулами:

- $F = -T \ln Z$  – вільна енергія,
- $E = -T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left( \frac{F}{T} \right)$  – внутрішня енергія,
- $C = \frac{\partial E}{\partial H}$  – теплоємність,
- $M = -\frac{\partial F}{\partial H}$  – намагніченість,
- $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$  – магнітна сприйнятливість.

Наведемо графіки для дослідження кількох термодинамічних величин.

Залежність теплоємності від температури при нульовому полі (див. рис. 3.1) була побудована при значеннях  $S = 1/2$ ,  $N_1 = 16$ ,  $N_2 = 10$ .

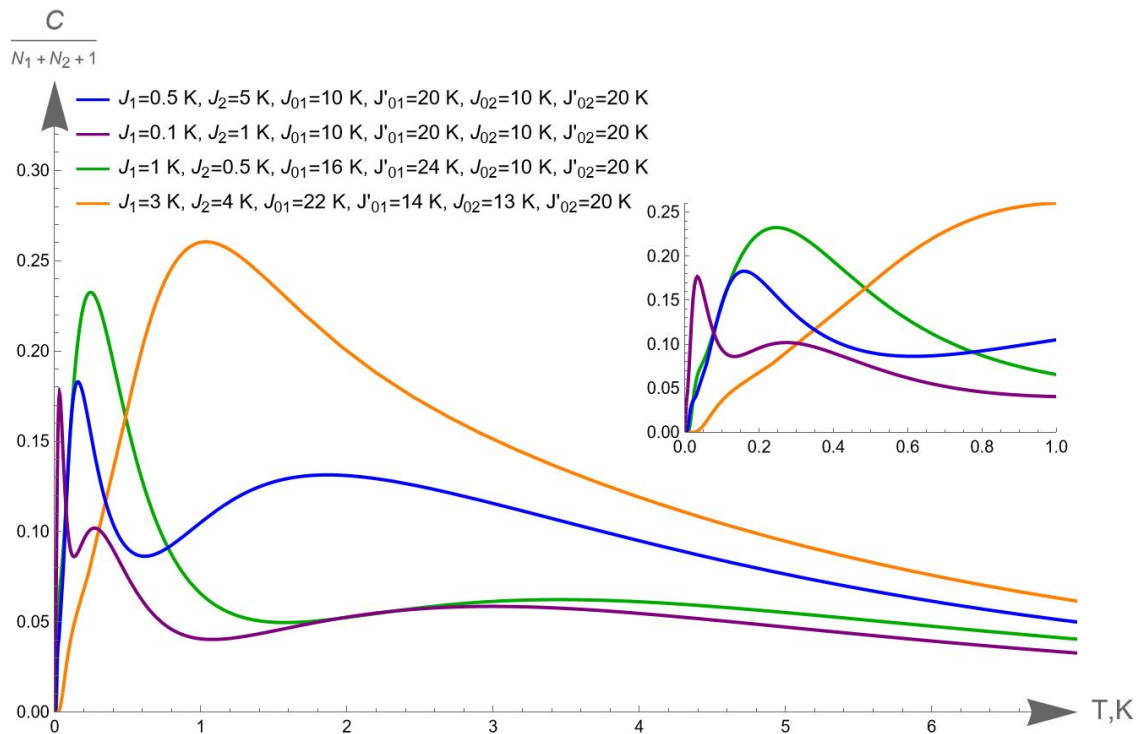


Рис. 3.1. Графік залежності теплоємності від температури

Побудовано кілька графіків залежності намагніченості від температури для  $J_1 = 3 K$ ,  $J_2 = 5 K$ ,  $J_{01} = -1 K$ ,  $J_{02} = -2 K$ ,  $g_0 = 1.3$ ,  $g_1 = 1$ ,  $g_2 = 2$ ,  $\mu_B = 1$ ,  $N_1 = 8$ ,  $N_2 = 16$ ,  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 10$  при різних комбінаціях обмінної взаємодії (див. Рис. 3.2).

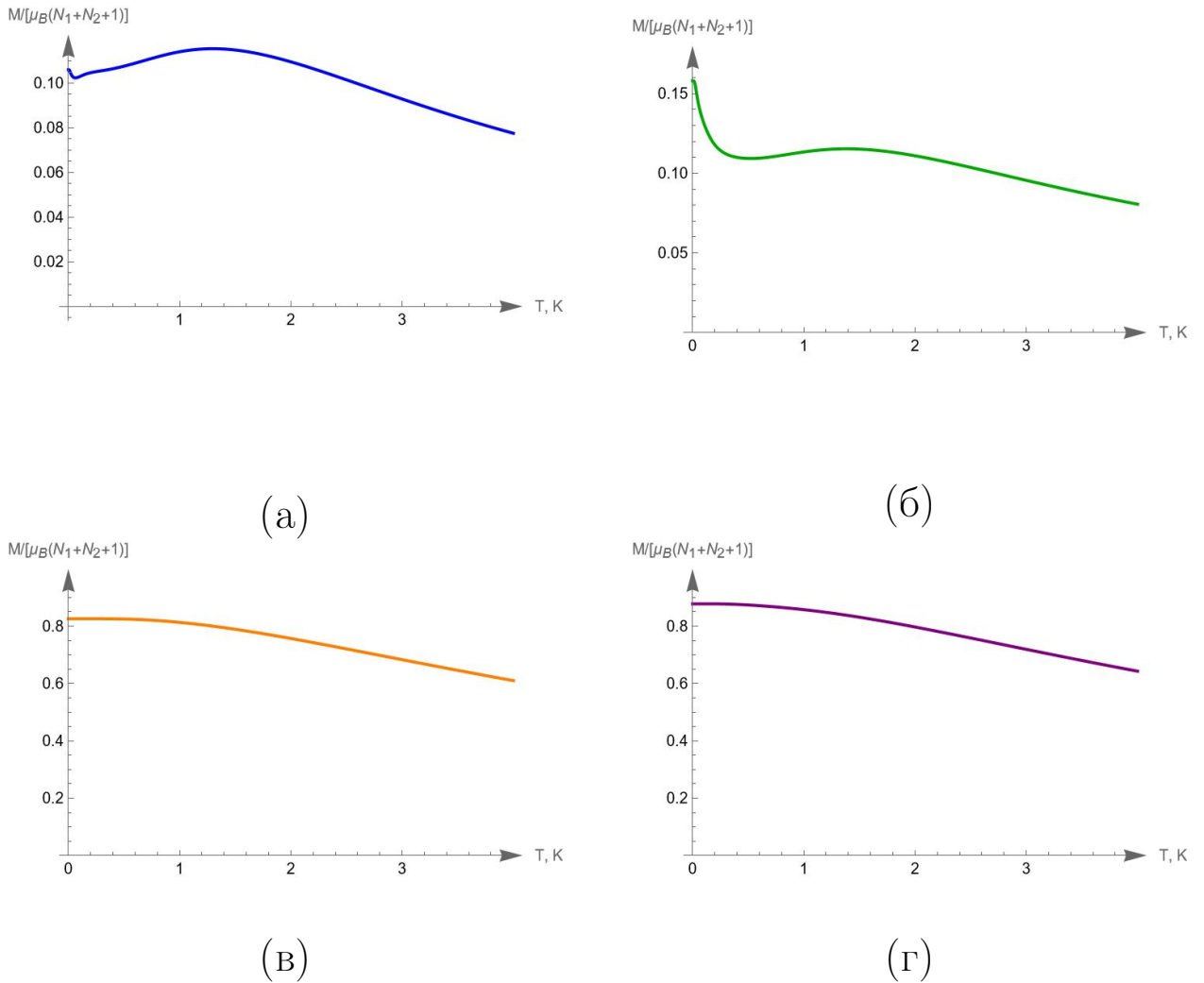


Рис. 3.2. Залежність намагніченості від температури: (а)  $H = 0.5$  (довільні одиниці),  $S = 0.5$ , (б)  $H = 0.5$  (довільні одиниці),  $S = 1.5$ , (в)  $H = 5$  (довільні одиниці),  $S = 0.5$ , (г)  $H = 5$  (довільні одиниці),  $S = 1.5$ .

Також наведено графік залежності намагніченості від поля при  $J_1 = 3 K$ ,  $J_2 = 5 K$ ,  $J_{01} = -1 K$ ,  $J_{02} = -2 K$ ,  $g_0 = 1.3$ ,  $g_1 = 1$ ,  $g_2 = 2$ ,  $\mu_B = 1$ ,  $N_1 = 8$ ,  $N_2 = 16$ ,  $n_1 = 1$ ,

$n_2 = 10, T = 0.01 K$  (див. Рис. 3.3).

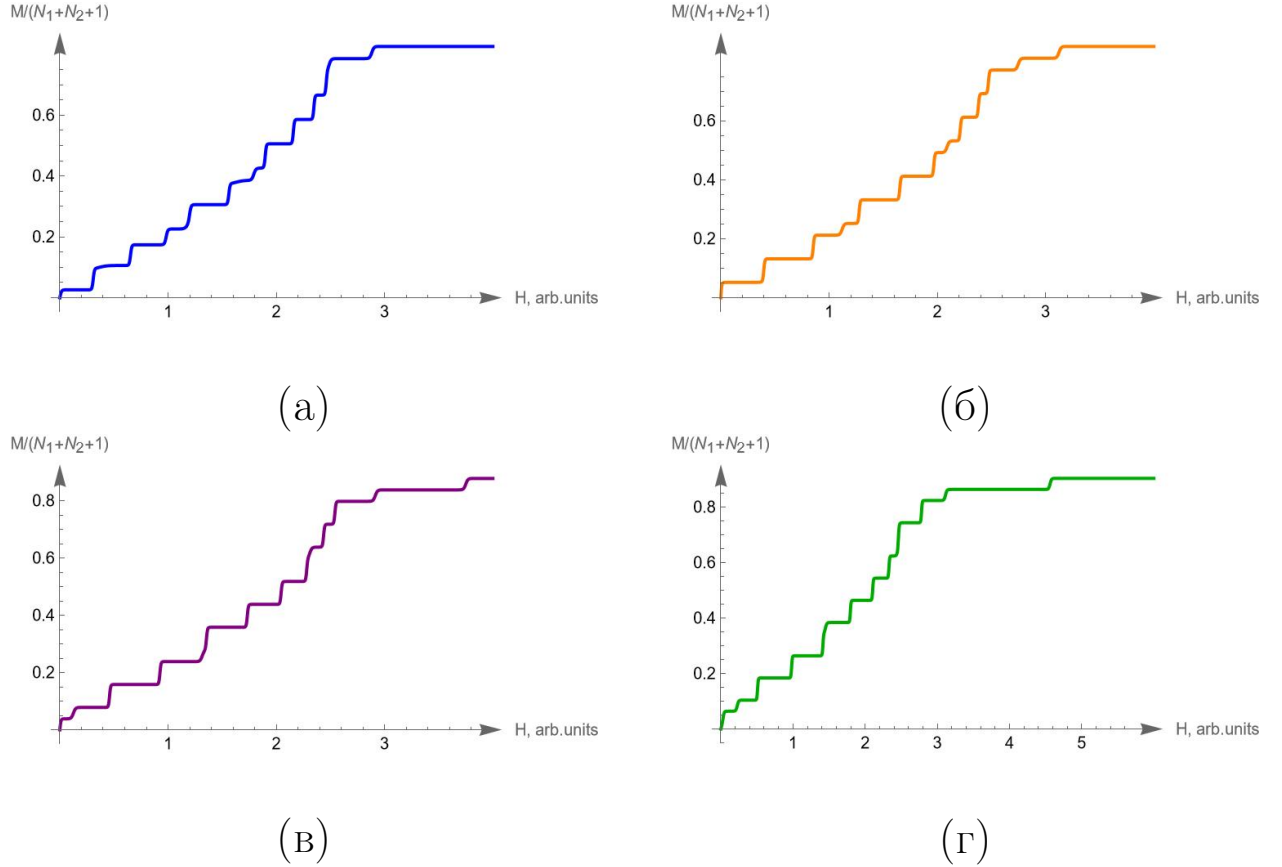


Рис. 3.3. Графіки залежності намагніченості від поля: (а)  $S = 1/2$ , (б)  $S = 1$ , (в)  $S = 3/2$ , (г)  $S = 2$

Середнє значення Z-проекції домішкового спіну також можна розрахувати за допомогою термодинамічного усереднення за формулою:

$$\langle \tilde{S}_0^z \rangle = Tr \left( \hat{\rho} \tilde{S}_0^z \right) = \frac{1}{Z} Tr \left( \tilde{S}_0^z e^{-\frac{\hat{H}}{T}} \right) = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S}^S \sigma Z(\sigma).$$

Також необхідно зазначити рівняння для знаходження середнього значення проекції (не домішкового) спіна ланцюжка.

$$\langle S_n^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S}^S Z(\sigma) \langle S_n^z(\sigma) \rangle, \quad (3.2)$$

де

$$\langle S_n^z(\sigma) \rangle = \frac{1}{2} - \langle a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} \rangle. \quad (3.3)$$

Для знаходження значення  $\langle S_n^z \rangle$  необхідно розписати величину заповнення стану  $\langle a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} \rangle$ . Нам відомо, що:

$$\begin{aligned} |1\rangle &= a_{\lambda\sigma}^\dagger |0\rangle = \sum_{n=1}^{N_1} U_n a_{n\sigma}^\dagger |0\rangle; \\ a_{\lambda\sigma}^\dagger &= \sum_{n=1}^{N_1} U_n(\lambda) a_{n\sigma}^\dagger; & a_{n\sigma}^\dagger &= \sum_{\lambda} U_n^*(\lambda) a_{\lambda\sigma}^\dagger; \\ a_{\lambda\sigma} &= \sum_{n=1}^{N_1} U_n^*(\lambda) a_{n\sigma}; & a_{n\sigma} &= \sum_{\lambda} U_n(\lambda) a_{\lambda\sigma}. \end{aligned}$$

Відповідно можемо переписати заповнення стану наступним чином:

$$\begin{aligned} \langle a_{n\sigma}^\dagger a_{n\sigma} \rangle &= \sum_{\lambda} U_n^*(\lambda) a_{\lambda\sigma}^\dagger \sum_{\lambda'} U_n(\lambda') a_{\lambda'\sigma} = \\ &= \sum_{\lambda, \lambda'} U_n^*(\lambda) U_n(\lambda') \underbrace{\langle a_{\lambda\sigma}^\dagger a_{\lambda'\sigma} \rangle}_{f(\varepsilon_{\lambda\sigma})\delta_{\lambda, \lambda'}} = \\ &= \sum_{\lambda} |U_n(\lambda)|^2 f(\varepsilon_{\lambda\sigma}) = \sum_{\lambda} |U_n(\lambda)|^2 \frac{1}{\exp(\varepsilon_{\lambda\sigma}/T) + 1}. \end{aligned}$$

Тоді рівняння (3.3) має вигляд:

$$\langle S_n^z(\sigma) \rangle = \frac{1}{2} - \sum_{\lambda} |U_n(\lambda)|^2 \frac{1}{\exp(\varepsilon_{\lambda\sigma}/T) + 1}.$$

Підставивши цей результат до рівняння (3.2), отримаємо остаточну формулу для знаходження середнього значення проекції  $n$ -ого спіну кільця:

$$\langle S_n^z \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S}^S Z(\sigma) \left[ \sum_{\lambda} |U_n(\lambda)|^2 \frac{1}{\exp(\varepsilon_{\lambda\sigma}/T) + 1} \right].$$

Побудуємо графіки залежностей середніх значень (див. рис. 3.4) при наступних параметрах:  $J_1 = 3 K$ ,  $J_2 = 5 K$ ,  $J_{01} = -1 K$ ,  $J_{02} = -2 K$ ,  $g_0 = 1.3$ ,  $g_1 = 1$ ,  $g_2 = 2$ ,  $\mu_B = 1$ ,  $N_1 = 8$ ,  $N_2 = 16$ ,  $n_1 = 1$ ,  $n_2 = 10$ ,  $T = 0.01 K$ . Параметри підібрані так, щоб продемонструвати нестійку поведінку в слабких полях.

На (рис. 3.4) ми можемо побачити зміну картини при збільшенні значення спіну домішки. Найяскравішу картину нестійкої поведінки бачимо для спіну  $S_0 = 1/2$  (рис. 3.4(а)), домішковий спін кілька разів змінює свій напрям. При збільшенні величини домішкового спіну він "швидше" орієнтується по полю. Найкраще це видно на (рис. 3.4(г)). На цьому ж рисунку видно, що середнє значення Z-проекції спіну найближчого до домішкового ( $n_1 = 1$ ), в даному випадку спін першого ланцюжка залишається від'ємним до "великих" значень поля. Спін з номером  $n_2 = 10$  для великих значень

спіну, таких, як  $S_0 = 3/2$  та  $S_0 = 2$ , вже майже не помічає подальшого збільшення спіну (рис. 3.4(в, г)).

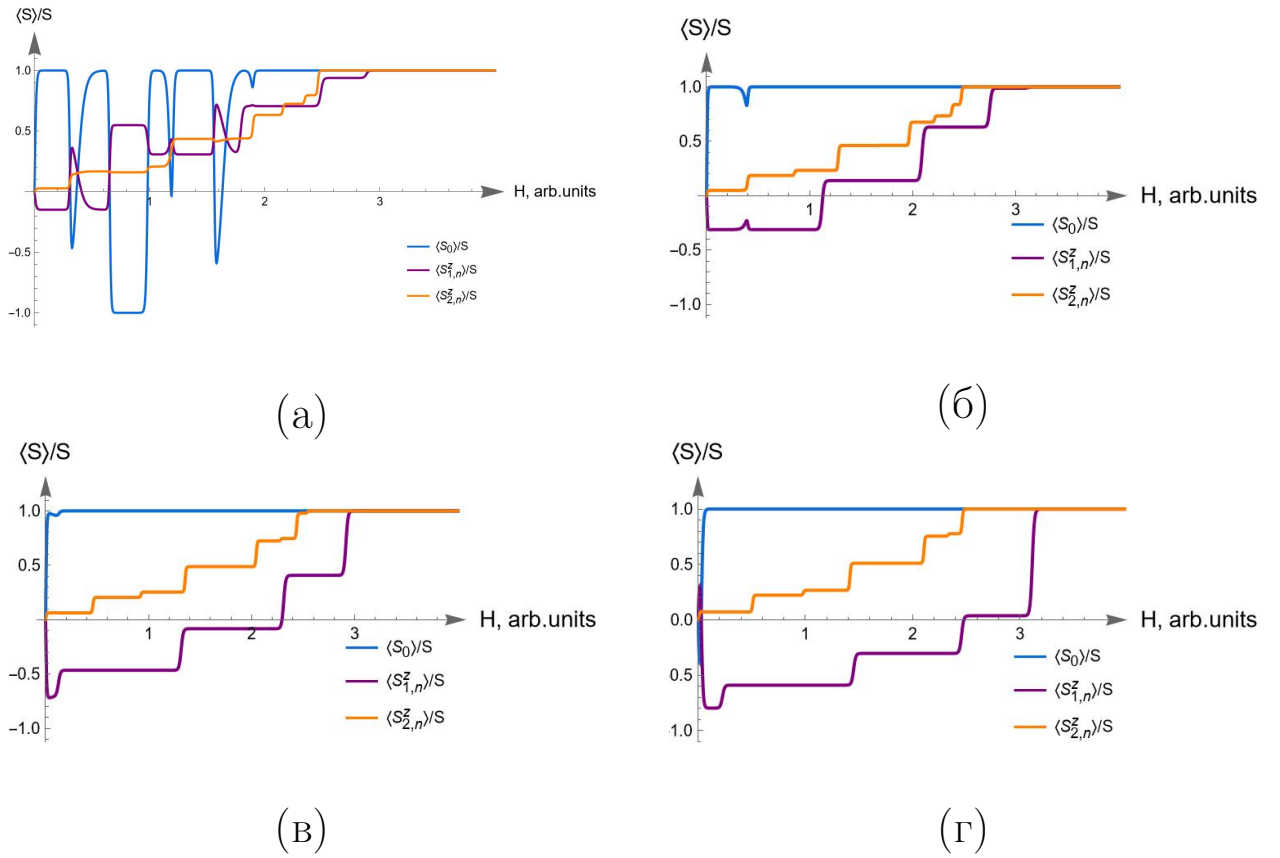


Рис. 3.4. Польова залежність середніх значень домішкового спіну та його двох найближчих сусідів на XX ланцюжках: (а)  $S = 1/2$ , (б)  $S = 1$ , (в)  $S = 3/2$ , (г)  $S = 2$

## ВИСНОВКИ

В даній роботі було розглянуто одновимірну спінову модель квантової теорії магнетизму, яка має точні розв'язки для спектру стаціонарних станів.

Було запропоновано спінову модель, що представляє собою два замкнених спінових ХХ-ланцюжка, які мають один спільний домішковий ізінгівський спін. Дана модель мала три варіації: з чотирма однаковими взаємодіями спільного спіну  $\tilde{S}_0^z$  із «найближчими сусідами», з попарно рівними взаємодіями та з усіма різними обмінними взаємодіями.

Для всіх варіантів моделей були виконані перехід Йордана-Вігнера та діагоналізація гамільтоніанів. Записані рівняння для пошуку хвильових функцій та їх розв'язки.

Отримані та проаналізовані дисперсійні рівняння та умови існування локальних рівнів.

Побудовані спектри стаціонарних станів з одним перевернутим спіном для випадків всіх різних і попарно однакових зв'язків.

Розглянуто термодинамічні властивості та побудовані графіки залежностей теплоємності від температури, намагніченості від магнітного поля, намагніченості від температури при різних значеннях домішкового спіну та магнітного поля.

Виявлено можливість нестійкої поведінки середнього значення Z-проекції додаткового спіну при певних значеннях параметрів моделі.

Результати цієї роботи були частково представлені на конференції IV International Conference "Condensed Matter & Low Temperature Physics" [15] під час постерної сесії.

## СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

- [1] Mikeska H.S. One-Dimensional Magnetism. / H.S. Mikeska, A.K. Kolezhuk // Lect. Notes Phys. — 2004. — V. 645. — P. 1–83.
- [2] Zvyagin A.A. Quantum Theory of One-Dimensional Spin Systems. / A.A. Zvyagin // Cambridge Scientific Publishers — 2010. — P. 330.
- [3] Zvyagin A.A. Finite Size Effects in Correlated Electron Models: Exact Results. / A.A. Zvyagin // Imperial College Press, London — 2005. — P. 367.
- [4] Mattis D. The Theory of Magnetism Made Simple. / D. Mattis // World Scientific Publishing — 2006. — P. 580.
- [5] Baxter R.J. Exactly Solved Models in Statistical Mechanics. / R.J. Baxter // Academic Press — 1982. — P. 496.
- [6] Bethe H. I. Eigenwerte und Eigenfunktionen der linearen Atomkette. / H. Bethe // Zeitschrift für Physik — 1931. — V. 71. — P. 205–226.
- [7] Yang C.N. One-Dimensional Chain of Anisotropic Spin-Spin Interactions. I. Proof of Bethe's Hypothesis for Ground State in a Finite System. / C.N. Yang, C.P. Yang // Phys. Rev., 1966. — V. 150. Iss. 1. — P. 321-327.
- [8] Fradkin E. Field theories of condensed matter physics / E. Fradkin. // Cambridge University Press. — 2013. — V. 2. — P. 838.

- [9] Onzager L. Crystal Statistics. I. A Two-Dimensional Model with an Order-Disorder Transition. / L. Onzager // Phys. Rev. — 1944. — V. 65. Iss. 3-4. — P. 117-149.
- [10] Lieb E. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. / E. Lieb, J. Schultz, D. Mattis // Ann. Phys. — 1961. — V. 16. Iss. 3. — P. 407-466.
- [11] Jordan P. Über das Paulische Äquivalenzverbot. / P. Jordan, E. Wigner // Z.Phys. — 1928. — V. 47. — P. 631-651.
- [12] Ezerskaya E.V. The Energy Spectrum and Thermodynamics of Spin-1/2 XX Chain with Ising Impurities. / E.V. Ezerskaya // Acta Physica Polonica Series A. — 2017. — V. 131. Iss. 4. — P. 928-930.
- [13] Artemov A.V. Low-temperature properties of finite XX-chains with additional Ising spin. / A.V. Artemov, E.V. Ezerskaya // Low Temp. Phys. — 2018. — V. 44. Iss. 12. — P. 1285-1292.
- [14] Ezerskaya E.V. Quantum stationary states of quasi-one-dimensional magnetic system. / E.V. Ezerskaya, V.M. Tsukernik // Low Temp. Phys. — 1983. — V. 9. Iss. 10. — P. 1082-1091.
- [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 physics. Conference Program & Book of Abstracts. — 2024. — P. 145.