

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

«___» грудня 2025 р.

доц. Рашба Г.І. _____

«___» грудня 2025 р.

Коваленко Вікторія Олександрівна

Низькотемпературні властивості двох скінченних спінових

XX-ланцюжків, з'єднаних через два Ізингівські спіни

Дипломна робота на здобуття
освітньо-кваліфікаційного рівня
«Магістр» 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 2025

Анотація

Коваленко В.О. Низькотемпературні властивості двох скінченних спінових ХХ-ланцюжків, з'єднаних через два Ізингівські спіни – Рукопис.

Дипломна робота на здобуття освітньо-кваліфікаційного рівня “Магістр” за спеціальністю 104 – «фізика та астрономія». – Харків: ХНУ імені В. Н. Каразіна, 2025. - 51 ст. - Іл. 13.

Розглянуто точно розв'язувані квантові моделі, що ґрунтуються на скінченних спінових ХХ-ланцюжках, які з'єднані двома проміжними Ізингівськими спінами. 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: ХУ-ланцюжок, ХХ-ланцюжок, zz-спін, гамільтоніан, перетворення Йордана–Вігнера, енергетичний спектр, поляризація, намагніченість, стрибки магнітного моменту, термодинамічні характеристики, теплоємність.

Abstract

Kovalenko V.O. Magnetic Properties of Two Finite spin-1/2 XX Chains Connected through Two Ising spins - Manuscript.

Dissertation for the degree of Master in the specialty 104 - Physics and Astronomy - Kharkiv: V. N. Karazin Kharkiv National University, 2025. - 50 p. - Ill. 13.

Exactly solvable quantum models based on finite XX spin chains coupled via two intermediate Ising spins are considered. Analytical and numerical calculations of the exact energy spectrum of the model have been performed, as well as computer simulations of the field and temperature dependences of magnetization and specific heat, and of local thermodynamic characteristics.

Keywords: XY-chain, XX-chain, Ising spin, Hamiltonian, Jordan–Wigner transformation, energy spectrum, polarization, magnetization, magnetization jumps, thermodynamic characteristics, heat capacity.

ЗМІСТ

РОЗДІЛ 1 ТЕОРЕТИЧНИЙ ОГЛЯД СПІНОВИХ ЛАНЦЮЖКІВ	7
1.1 СПІНОВІ ХУ-ЛАНЦЮЖКИ	7
1.1.1 Ферміонізація та динамічні властивості	7
1.1.2 Взаємодія Дзелялошинського–Морі та руйнування симетрії	8
1.1.3 Безлад і його корельовані форми	9
1.1.4 Регулярне чергування та метод неперервних дробів	9
1.1.5 Спін-Пайєрлсівська нестійкість	10
1.1.6 Роль ХУ-ланцюжків у квантовій фізиці	11
1.2 ХХZ-ЛАНЦЮЖОК У НЕКОМУТАЦІЙНОМУ МАГНІТНОМУ ПОЛІ	11
1.2.1 Вихідна модель	11
1.2.2 Квазіодновимірний антиферромагнетик та ефективний спін- $1/2$	12
1.2.3 Роль поперечного (некомутаційного) магнітного поля	13
1.2.3.1 Симетрія та її порушення	13
1.2.3.2 Виникнення спін-флопового антиферромагнітного порядку	13
1.2.5.1 Некомутаційність як джерело флуктуацій	14
1.2.5.2 Відсутність далекого порядку при ненасиченій намагніченості	15
1.2.6 Спін-рідинна фаза між критичним полем і полем насичення	15
1.2.7 Структура фазової діаграми ХХZ-ланцюжка з некомутаційним полем	16
1.3 ДОВІДКА З ФОРМУЛАМИ	17
РОЗДІЛ 2 СКІНЧЕННІ СПІНОВІ ХХ-ЛАНЦЮЖКИ, ПОЄДНАНІ ДВОМА ДОДАТКОВИМИ ІЗИНГІВСЬКИМИ СПІНАМИ	19
2.1 ГАМІЛЬТОНІАН ДВОХ ХХ-ЛАНЦЮЖКІВ, ПОЄДНАНИХ ЧЕРЕЗ ДВА ВНУТРІШНІ ZZ-СПІНИ	19
2.2 РОЗРАХУНКИ	20
2.3 МОДЕЛЮВАННЯ	27
РОЗДІЛ 3 ХХ-ЛАНЦЮЖКИ, ПОЄДНАНІ ЧЕРЕЗ ДВА ZZ-СПІНИ	30
3.1 ГАМІЛЬТОНІАН ДВОХ ХХ-ЛАНЦЮЖКІВ, ПОЄДНАНИХ ДВОМА ZZ-СПІНАМИ ..	30
3.2 РОЗРАХУНКИ	31
3.3 МОДЕЛЮВАННЯ	33
РОЗДІЛ 4 ЧОТИРИ ХХ-ЛАНЦЮЖКИ, ПОЄДНАНІ ZZ-СПІНОМ	35
4.1 ГАМІЛЬТОНІАН ХХ-ЛАНЦЮЖКІВ, ПОЄДНАНІ ZZ-СПІНОМ	35
4.2 РОЗРАХУНКИ	36
4.3 МОДЕЛЮВАННЯ	42
СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ	49

ВСТУП

Низьковимірні квантові спінові системи є одним із ключових об'єктів сучасної теорії квантового магнетизму. Одновимірні спінові ланцюжки з різними типами обмінної взаємодії слугують базовими модельними системами для дослідження квантових кореляцій, флуктуацій та низькотемпературних магнітних властивостей [1-5].

Перший розділ роботи має теоретичний характер і присвячений огляду властивостей XY- та XXZ-спінових ланцюжків. Цей розділ формує методологічну та концептуальну основу для подальшого дослідження подальших спінових моделей [6-7].

У другому розділі роботи проведено теоретичне дослідження спінової системи, побудованої з двох скінченних XX-ланцюжків, що поєднуються між собою за допомогою додаткових ізінгівських спінів. Такий тип зв'язку дозволяє звести складну багатоспінову задачу до ефективних XX-моделей із параметрами, що залежать від стану домішкових спінів, і тим самим отримати точний опис спектральних і термодинамічних властивостей системи.

У третьому розділі аналізується спрощений варіант попередньої моделі, у якому додаткові ізінгівські спіни впливають на один і той самий спін у кожному з XX-ланцюжків. Така конфігурація дозволяє детальніше дослідити роль локальних зв'язків та граничних ефектів.

Четвертий розділ присвячено дослідженню більш складної системи, що складається з чотирьох скінченних XX-ланцюжків, приєднаних до центрального домішкового zz-спіна.

Метою даної роботи є теоретичне дослідження енергетичного спектра та низькотемпературних магнітних властивостей скінченних XX-спінових систем зі складною топологією, зумовленою наявністю додаткових ізінгівських спінів.

Були поставлені такі *завдання дослідження*:

- побудова гамільтоніанів досліджуваних моделей та їх аналіз;
- точна діагоналізація гамільтоніанів;
- дослідження спектра стаціонарних станів;
- моделювання основних термодинамічних величин при

низьких температурах.

Об'єктом дослідження є скінченні низьковимірні квантові спінові системи типу XX-ланцюжків із домішковими ізінгівськими спінами.

Предметом дослідження є енергетичний спектр та термодинамічні характеристики XX-ланцюжків, поєднаних між собою за допомогою додаткових ізінгівських спінів.

Достовірність отриманих результатів забезпечується використанням стандартних методів квантової теорії магнетизму, зокрема перетворення Йордана–Вігнера, точного розв'язання одночастинкових рівнянь, аналізу спектра; розрахунків та подальшого моделювання термодинамічних величин, отриманих за відомими формулами статистичної фізики.

РОЗДІЛ 1

ТЕОРЕТИЧНИЙ ОГЛЯД СПІНОВИХ ЛАНЦЮЖКІВ

1.1 Спінові ХУ-ланцюжки

Одновимірні квантові спінові системи типу ХУ зі спінами $S = \frac{1}{2}$ посідають особливе місце у фізиці конденсованого стану [6, 8]. Їхня унікальність полягає в тому, що значна частина статистико-механічних характеристик цих моделей може бути отримана строго, без будь-яких наближень. Центральну роль у цьому відіграє перетворення Йордана–Вігнера, яке переводить ланцюжок взаємодіючих спінів у систему невзаємодіючих безспінових ферміонів. Саме завдяки цьому ХУ-ланцюжок у поперечному полі

$$H = \sum_n \Omega s_n^z + \sum_n (J_x s_n^x s_{n+1}^x + J_y s_n^y s_{n+1}^y)$$

виступає еталонною квантовою моделлю для тестування методів статистичної фізики, а також базовим випадком для інтерпретації експериментів у квазіодновимірних магнетиках.

1.1.1 Ферміонізація та динамічні властивості

Після ферміонного відображення гамільтоніан набуває білінійного вигляду [6], що дозволяє отримати енергії елементарних збуджень

$$\Lambda_\kappa = \Omega + J \cos \kappa \quad (J_x = J_y = J)$$

та аналітично записати низку динамічних характеристик. Зокрема, динамічний структурний фактор $S^{zz}(\kappa, \omega)$ є точним двоферміонним континуумом, у якому збудження утворюються шляхом перенесення ферміона з одного імпульсного стану в інший. Межі цього континууму визначаються дисперсією Λ_κ , а його

структура істотно змінюється між низькими та високими температурами (через фермі-функції).

На відміну від zz -динаміки, кореляції xx -типу нелокально пов'язані з багатоферміонними операторами, що унеможлиблює простий аналітичний вираз. Проте числові розрахунки засвідчують, що двоферміонний континуум усе одно визначає основну структуру спектральної ваги, а багаточастинкові збудження лише додають слабкі вклади вище верхньої межі континууму. Таким чином, навіть у складних кореляційних функціях загальний фізичний зміст усе ще контролюється простою ферміонною картиною.

1.1.2 Взаємодія Дзелялошинського–Морії та руйнування симетрії

У реальних магнетиках часто присутня взаємодія Дзелялошинського–Морії (ДМ) [2, 3, 9, 10], що має вигляд

$$\sum_n \mathbf{D} \cdot (\mathbf{s}_n \times \mathbf{s}_{n+1}).$$

При $\mathbf{D} \parallel z$ модель зберігає можливість строгого розв'язання, але спектр збуджень стає асиметричним щодо $\kappa \rightarrow -\kappa$. Фізично це відповідає спіральному (закрученому) нахилу спінів від вузла до вузла.

У випадку ізотропного ХУ-ланцюжка ДМ-взаємодія може бути усунена локальним поворотом спінів навколо осі z , що приводить до заміни

$$J \rightarrow J_{\text{eff}} = \sqrt{J^2 + D^2}.$$

Однак ця процедура вносить фазові фактори у поперечні кореляції, тому xx -динаміка істотно ускладнюється, хоча zz -динаміка залишається впорядкованою. Таким чином, ДМ-взаємодія суттєво змінює динаміку, але не руйнує інтегровності системи.

1.1.3 Безлад і його корельовані форми

Якщо параметри J_n та Ω_n випадкові, XY-ланцюжок після ферміонізації перетворюється на одночастинкову ферміонну модель з безладом [4, 6, 8]. Для лоренцових розподілів параметрів можливо провести строге усереднення Зеленої функції (функція, яка описує, як система реагує на локальне збурення) і знайти густину станів аналітично:

$$\rho(E) = -\frac{1}{\pi} \text{Im}G(E).$$

Цікавим є випадок корельованого безладу, коли випадкові обміни та випадкові поля пов'язані умовою

$$\Omega_n - \Omega_0 = \frac{a}{2}(J_{n-1} + J_n - 2J_0).$$

Така кореляція [11, 12] призводить до асиметрії спектра навіть при нульовому середньому полі $\Omega_0 = 0$, що дає ненульову середню намагніченість

$$m_z = -\frac{1}{2} \int dE, \rho(E) \tanh \frac{\beta E}{2}$$

у межі $T \rightarrow 0$. Фізично це виникає тому, що вузли зі слабкими та сильними зв'язками мають різні локальні магнітні відповіді, і ці внески не компенсуються, хоч середнє поле нульове. Це той випадок, коли безлад самостійно індукує впорядкування (спонтанну намагніченість) у номінально неупорядкованій моделі.

1.1.4 Регулярне чергування та метод неперервних дробів

Регулярно черговані зв'язки та поля (димеризація, тримеризація, супергратки) ведуть до того, що спектр стає багатозонним [11]. Метод неперервних дробів дозволяє строго знайти діагональні елементи Зеленої функції і густину станів у випадках періоду p . Це дає змогу точно описати

магнітаційні плато при $T = 0$, які задовольняють умові Осіківи–Аффлека–Йошіди:

$$p(s - m_z) \in \mathbb{Z}.$$

Плато відображають те, що певні підзони спектра повністю заповнені або порожні; між ними магнітизація змінюється плавно.

Для трансверсного Ізінга плато не виникають, бо $[\sum s_n^z, H] \neq 0$, але структура квантових фазових переходів усе одно істотно змінюється через багатозонність спектра.

1.1.5 Спін-Пайєрлсівська нестійкість

Коли зв'язки модулюються як

$$J_n = J(1 - (-1)^n \delta),$$

то енергія основного стану ізотропного XY-ланцюжка зменшується при малому δ як

$$e_0(\delta) \simeq e_0(0) + \frac{|J|}{2\pi} \delta^2 \ln \delta,$$

що означає, що система енергетично вигідно димеризується [6] (самовільно переходить у стан, де зв'язки або відстані між вузлами чергуються як сильний–слабкий–сильний–слабкий...). Це — квантовий аналог спін-Пайєрлсівського переходу. Поперечне поле Ω може зруйнувати цю нестійкість, породжуючи багату фазову діаграму зі стабільними димеризованими, недимеризованими та змішаними областями.

ДМ-взаємодія може як підсилювати, так і послаблювати димеризацію залежно від того, чи модулюється вона синфазно зі зв'язками.

1.1.6 Роль XY-ланцюжків у квантовій фізиці

XY-ланцюжки служать базою [6, 13-15] для:

- аналізу аперіодичних структур, хаотичних магнітів і моделей з квазіперіодичністю;
- дослідження нерівноважної динаміки (еволюції доменних стінок, кластерів, транспортних процесів);
- вивчення кореляцій, заплутаності та фундаментальних квантових характеристик.

Розгляд XY-ланцюжків дозволяє детально простежити роль поперечних обмінних взаємодій та пов'язаних із ними квантових флуктуацій, однак така модель навмисно позбавлена поздовжньої компоненти $S^z S^z$, яка у реальних магнітних системах майже ніколи не зникає. Відсутність цього терміна спрощує аналіз, але водночас обмежує можливість описувати низку важливих ефектів — появу енергетичної щілини, зміну характеру кореляцій чи формування довгого порядку. Тому природним наступним кроком у розвитку теоретичної картини є перехід до XXZ-ланцюжка, який доповнює XY-модель поздовжньою взаємодією та дає змогу дослідити, як навіть слабке введення $S^z S^z$ -терміна змінює спектр, критичні властивості та типи магнітних станів. Тож розглянемо XXZ-модель, переходячи від ідеалізованого випадку до опису більш реалістичних квантових магнетиків.

1.2 XXZ-ланцюжок у некомутаційному магнітному полі

1.2.1 Вихідна модель

Розглядається одновимірний квантовий антиферромагніт зі спіном $S = 1/2$, описаний гамільтоніаном типу XXZ у зовнішньому магнітному полі [7]. Повний гамільтоніан має вигляд

$$H = J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z) + \sum_i (B_x S_i^x + B_z S_i^z)$$

де

- $J > 0$ — константа антиферромагнітного обміну,
- $\Delta \in (0,1)$ — XY-подібна анізотропія,
- B_x, B_z — компоненти магнітного поля у локальних координатах спіну.

Ключова властивість моделі полягає в відсутності комутації поперечного поля $B_x S_i^x$ з XXZ -частиною гамільтоніана:

$$[H_{XXZ}, B_x S^x] \neq 0$$

що неминує створює квантові флуктуації, здатні якісно змінити структуру основного стану.

1.2.2 Квазіодновимірний антиферромагнетик та ефективний спін- $\frac{1}{2}$

У ряді реальних сполук йони перехідних металів мають повний спін $\tilde{S} > 1/2$, але кристалічне поле часто розщеплює мультиплет на кілька дублетів, відокремлених енергетичними проміжками, значно більшими за обмін J [7]. Якщо енергія збудження верхнього дублета $2D \gg J$, то при низьких температурах ефективна динаміка зводиться до нижнього дублета $|\pm \frac{1}{2}\rangle$, і система строго еквівалентна спін- $1/2$ XXZ -ланцюжку.

При цьому ефективні g -фактори $g_x = g_y \neq g_z$ створюють природну анізотропію, а максимальний магнітний момент, який може бути реалізований у площині XY:

$$m_{\max} = \frac{g_{x,y} \mu_B}{2}.$$

Таким чином, фізична система природно реалізує одновимірний XXZ -магніт зі спіном- $\frac{1}{2}$ та XY-подібною анізотропією.

1.2.3 Роль поперечного (некомутаційного) магнітного поля

1.2.3.1 Симетрія та її порушення

За відсутності поперечного поля модель має безперервну $U(1)$ -симетрію поворотів у площині x_y [7].

$U(1)$ -симетрія у XXZ -ланцюжку означає інваріантність гамільтоніана

$$H_{\text{XXZ}} = J \sum_i (S_i^x S_{i+1}^x + S_i^y S_{i+1}^y + \Delta S_i^z S_{i+1}^z)$$

відносно одночасного повороту всіх спінів у площині XY на довільний кут ϕ :

$$S_i^+ \rightarrow e^{i\phi} S_i^+, \quad S_i^- \rightarrow e^{-i\phi} S_i^-,$$

де $S_i^\pm = S_i^x \pm iS_i^y$. Додавання поперечного поля

$$H_+ = B_x \sum_i S_i^x$$

руйнує цю симетрію, бо $B_x S^x$ не є інваріантним під такою трансформацією, воно знижує симетрію до дискретної симетрії відбиття $S^y \rightarrow -S^y$. Це порушення симетрії є нетривіальним, оскільки XXZ -ланцюжок при $\Delta < 1$ у нульовому полі має безщілинний спектр і степеневі кореляції; натомість поява дискретної симетрії створює умови для виникнення довгого антиферомагнітного порядку в напрямку, перпендикулярному до поля.

1.2.3.2 Виникнення спін-флопового антиферомагнітного порядку

При малих і помірних B_x основний стан набуває структури, у якій компоненти спіну, перпендикулярні до поля (наприклад, S_y), формують антиферомагнітне впорядкування [7]. Водночас компонента вздовж поля S_x

генерує феромагнітну складову. Така комбінація відхилених спінів називається спін-флоповим антиферомагнітним станом.

Порядок виникає в напрямку, який мінімізує вплив квантових флуктуацій, спричинених поперечним полем. Фактично поле «відбирає» певний напрямок у просторі, зсуваючи основний стан від критичного безщільного режиму та стабілізуючи дискретно-впорядковану фазу.

1.2.4 Посилення антиферомагнітного порядку поперечним полем

Поперечне поле, хоч і створює флуктуації, до певного порогу діє стабілізуюче: воно

- зменшує безперервність спінових ступенів свободи,
- частково «фіксує» напрямки спінів,
- пригнічує частину нульових коливань.

У результаті модуль антиферомагнітного моменту зростає, а температура переходу в упорядкований стан також підвищується. Це корелює з загальною властивістю XY-анізотропних систем: коли U(1)-симетрія знижується до дискретної, порядок стає більш стійким, малочутливим до збурень [7].

1.2.5 Квантове руйнування порядку в сильному поперечному полі

1.2.5.1 Некомутаційність як джерело флуктуацій

Чим сильніше поле B_x , тим інтенсивніше воно змішує стани з різними значеннями S^z [7, 9]. X-компонента поля не має спільних власних станів із XXZ-частиною гамільтоніана, тому при збільшенні B_x флуктуації зростають швидше, ніж енергія обміну може їх стабілізувати.

У певному критичному полі

$$B_x = B_c$$

антиферромагнітне впорядкування руйнується: система переходить у фазу без далекого порядку.

1.2.5.2 Відсутність далекого порядку при ненасиченій намагніченості

Якщо фаза, що виникає при $B_x > B_c$, була б просто поляризованою [7, 9], то магнітний момент мав би наближатися до насиченого значення. Однак теоретичний аналіз XXZ-моделі показує, що руйнування порядку може відбуватися до насичення спінів. У цьому випадку намагніченість залишається ненасиченою, а кореляції спадають експоненційно.

Це означає, що нова фаза не є тривіально-поляризованою, а є квантово флуктуюючою фазою спін-рідинного типу.

1.2.6 Спін-рідинна фаза між критичним полем і полем насичення

Спін-рідина в одновимірній XXZ-моделі у поперечному полі — це фаза, що:

- не має далекого спінового порядку,
- має скінченну вимірну намагніченість, але ненасичену,
- характеризується експоненційним спаданням кореляцій,
- виникає внаслідок некомутаційних квантових флуктуацій, а не через тривіальну поляризацію.

Таку фазу теорія передбачає у проміжку

$$B_c < B_x < B_m,$$

де B_m — поле, необхідне для повної поляризації нижнього дублета (або ефективного спіну-1/2) [2, 3, 7].

Спін-рідина виникає, бо поперечне поле спочатку знижує симетрію і створює порядок, але при подальшому його збільшенні саме ж поле стає домінантним джерелом квантових флуктуацій, які надмірно «розмивають» антиферромагнітну структуру. Обмінна взаємодія більше не здатна конкурувати з флуктуаціями, і порядок руйнується, хоча спіни ще далеко до повної поляризації.

Це квантовий фазовий перехід, керований зовнішнім полем, і він не пов'язаний зі спонтанним симетрійним механізмом класичного типу.

1.2.7 Структура фазової діаграми XXZ-ланцюжка з некомутаційним полем

Теоретично передбачається така послідовність фаз при збільшенні поперечного поля [1, 2]:

1. Низьке поле: безперервна симетрія ще активна $\rightarrow$ сильні флуктуації $\rightarrow$ якщо є міжланцюжкові зв'язки, може виникати антиферромагнітний порядок.
2. Помірне поле: спін-флоповий антиферромагнітний порядок стабілізується, момент зростає.
3. Критичне поле B_c : квантові флуктуації руйнують далеке впорядкування.
4. Між B_c та B_m : квантова спін-рідина без далекого порядку й без насичення моменту.
5. Поле B_m : нижній дублет повністю поляризується — межа справжнього насичення спінів.
6. Високі поля: повна поляризація всієї мультиплетної структури (якщо вона враховується).

Додавання ZZ-взаємодії в XXZ-ланцюжку показує, наскільки чутливими є одновимірні спінові системи до порушення інтегровності та зміни симетрії. Однак у реальних матеріалах анізотропія та неоднорідність рідко розподілені рівномірно, і локальні відхилення параметрів можуть істотно модифікувати спектр та кореляції. З цієї перспективи XX-ланцюжок з локальним домішковим zz-спіном виступає проміжною моделлю, що дозволяє окремо простежити, як поодинокі порушення XX-симетрії впливає на локальні та колективні властивості системи. Домішка діє як точкове джерело анізотропії, створюючи локальні зміни густини станів, локалізовані або квазілокалізовані збудження та змінюючи характер кореляцій у просторі.

1.3 Довідка з формулами

Досліджувані моделі будуть зведені до гамільтоніану ідеального газу ферміонів, тому скористаємось методом пошуку статистичної суми для фермі-газу [2, 8, 14, 15].

Статистичні суми для двох XX-ланцюжків при фіксованих σ_1, σ_2 :

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

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

Для системи невзаємодіючих ферміонів існують тільки стани з кількістю частинок 0 або 1 через принцип заборони Паулі, тож після підсумовування по всіх можливих значеннях $\lambda_{\sigma_1, \sigma_2}$, статсуми розраховуються як

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

Вільна енергія повної системи:

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

Намагніченість: $M = -\frac{\partial F}{\partial H}.$

Магнітна сприйнятливість: $\chi = \frac{\partial M}{\partial H}.$

Внутрішня енергія: $E = -\frac{1}{N} T^2 \frac{\partial}{\partial T} \left(\frac{F}{T} \right).$

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

Середнє значення проєкції спінів-відростків на вісь Z :

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

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

Парний корелятор:

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

РОЗДІЛ 2

СКІНЧЕННІ СПІНОВІ ХХ-ЛАНЦЮЖКИ, ПОЄДНАНІ ДВОМА ДОДАТКОВИМИ ІЗИНГІВСЬКИМИ СПІНАМИ

2.1 Гамільтоніан двох ХХ-ланцюжків, поєднаних через два внутрішні zz-спіни

В даному розділі дипломної роботи ми перейдемо безпосередньо до розгляду першої з досліджуваних спінових систем, що складається з двох скінченних спінових ХХ-ланцюжків, що поєднуються двома проміжними Ізингівськими спінами (див. рис 2.1)

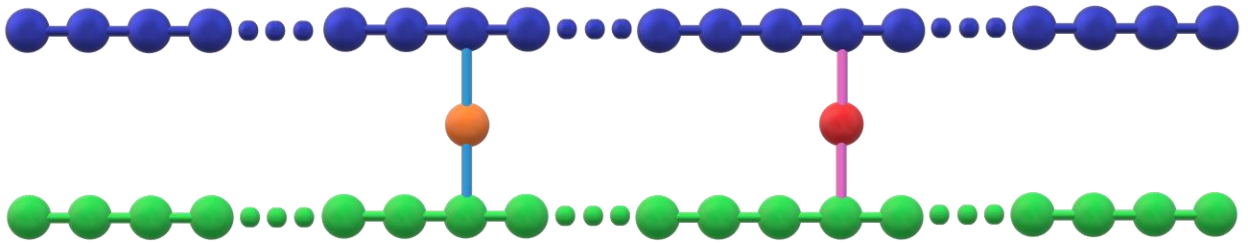


Рисунок 2.1 – Модель двох скінченних спінових ХХ-ланцюжків, поєднаних двома проміжними Ізингівськими спінами

Гамільтоніан системи записується в такому вигляді:

$$\begin{aligned}
 \mathbf{H} = & -g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} S_{1,n}^z - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} (S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y) - \\
 & -g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} S_{2,n}^z - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} (S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y) - \\
 & -g_{01} \mu_B H \sigma_1^z - g_{02} \mu_B H \sigma_2^z - J_{01} \sigma_1^z (S_{1,n_1}^z + S_{2,n_3}^z) - J_{02} \sigma_2^z (S_{1,n_2}^z + S_{2,n_4}^z).
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

де

- $-g_{1(2)} \mu_B H \sum_{n=1}^{N_{1(2)}} S_{1(2),n}^z$ — енергія Зеємана першого (другого) ланцюжка ХХ, довжиною $N_{1(2)}$, що описує взаємодію спінів $S_{1(2),n}$ із зовнішнім магнітним полем H ,

- $g_{1(2)}$ — g -фактор для спінів першого (другого) ланцюжка,
- μ_B — магнетон Бора,
- $S_{1(2),n}^z$ — проєкція спіну на вісь z ,
- знак « $\leftarrow$ » — зменшення енергії під час орієнтування спінів уздовж поля;
- $-J_{1(2)} \sum_{n=1}^{N_{1(2)}-1} \left(S_{1(2),n}^x S_{1(2),n+1}^x + S_{1(2),n}^y S_{1(2),n+1}^y \right)$ — обмінна взаємодія ХХ-типу між сусідніми спінами в першому (другому) ланцюжку,
 - $J_{1(2)}$ — константа обміну, яка визначає силу спін-спінової взаємодії,
 - знак « $\leftarrow$ » — феромагнітна взаємодія, якщо $J_{1(2)} > 0$;
- $-g_{01(02)} \mu_B H \sigma_{1(2)}^z$ — енергія Зеємана для двох Ізінгівських спінів (містків),
 - $g_{01(02)}$ — g -фактор на вузлі $n_{1(2)}$,
 - $\sigma_{1(2)}^z$ — оператор спіну для першого (другого) Ізінгівського спіну “домішкового” спіну, який відповідає проєкції спіну на вісь z ;
- $-J_{01(02)} \sigma_{1(2)}^z \left(S_{1,n_{1(2)}}^z + S_{2,n_{3(4)}}^z \right)$ — взаємодія першого (другого) Ізінгівського спіну з двома ХХ-ланцюжками,
 - $J_{01(02)}$ — константа зв’язку між першим (другим) Ізінгівським спіном і обома ХХ-ланцюжками,
 - знак « $\leftarrow$ » — зменшення енергії, коли напрямки спінів узгоджені певним чином.

2.2 Розрахунки

Для дослідження спектру стаціонарних станів спінової системи запишемо гамільтоніан через оператори породження та знищення,

використовуючи перетворення Йордана-Вігнера [4, 8]. Наявність домішок не заважає діагоналізації моделі.

Перейдемо спочатку до сходинок операторів, використовуючи перетворення

$$S_n^x = \frac{1}{2}(S_n^- + S_n^+); \quad S_n^y = \frac{i}{2}(S_n^- - S_n^+); \quad S_n^z = \frac{1}{2} - S_n^- S_n^+.$$

Маємо рівняння (2.1) у вигляді

$$\begin{aligned} \hat{H} = & -g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left(\frac{1}{2} - S_{1,n}^- S_{1,n}^+ \right) - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} \left(\frac{1}{2} (S_{1,n}^- S_{1,n+1}^+ + S_{1,n}^+ S_{1,n+1}^-) \right) - \\ & -g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left(\frac{1}{2} - S_{2,n}^- S_{2,n}^+ \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} \left(\frac{1}{2} (S_{2,n}^- S_{2,n+1}^+ + S_{2,n}^+ S_{2,n+1}^-) \right) - \\ & -g_{01} \mu_B H \sigma_1^z - J_{01} \sigma_1^z (1 - S_{1,n_1}^- S_{1,n_1}^+ - S_{2,n_1}^- S_{2,n_1}^+) - \\ & -g_{02} \mu_B H \sigma_2^z - J_{02} \sigma_2^z (1 - S_{1,n_2}^- S_{1,n_2}^+ - S_{2,n_2}^- S_{2,n_2}^+). \end{aligned}$$

Далі переходимо до операторів породження та знищення, використовуючи формули

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

та властивості цих операторів

$$\begin{aligned} (a_l^\dagger)^2 &= 0; & (a_l)^2 &= 0; \\ [a_m^\dagger, a_l]_+ &= a_m^\dagger a_l + a_l a_m^\dagger = 0; \\ [a_l^\dagger, a_l]_+ &= a_l^\dagger a_l + a_l a_l^\dagger = 1; \\ a_m^\dagger a_m a_l^\dagger a_l &= -a_m^\dagger a_l^\dagger a_m a_l = a_m^\dagger a_l^\dagger a_l a_m = a_l^\dagger a_l a_m^\dagger a_m. \end{aligned}$$

Маємо такий вигляд виразу для гамільтоніану:

$$\begin{aligned}\hat{H} = & -g_1\mu_B H \sum_{n=1}^{N_1} \left(\frac{1}{2} - a_{1,n}^\dagger a_{1,n} \right) - J_1 \sum_{n=1}^{N_1-1} (a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1} + a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n}) - \\ & -g_2\mu_B H \sum_{n=1}^{N_2} \left(\frac{1}{2} - a_{2,n}^\dagger a_{2,n} \right) - J_2 \sum_{n=1}^{N_2-1} (a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1} + a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n}) - g_{01}\mu_B H \sigma_1^z - \\ & -g_{02}\mu_B H \sigma_2^z - J_{01}\sigma_1^z (1 - a_{1,n_1}^\dagger a_{1,n_1} - a_{2,1}^\dagger a_{2,1}) - J_{02}\sigma_2^z (1 - a_{1,n_2}^\dagger a_{1,n_2} - a_{2,N_2}^\dagger a_{2,N_2}).\end{aligned}$$

Виділяємо з цього запису вираз для енергії «ферромагнітного» стану:

$$\begin{aligned}E_{ferro} = E_{f,1} + E_{f,2} = & -\frac{g_1\mu_B H N_1}{2} - (J_{01} + g_{01}\mu_B H) \sigma_1^z - \frac{g_2\mu_B H N_2}{2} - (J_{02} + g_{02}\mu_B H) \sigma_2^z. \\ E_{f,i} = & -\frac{g_i\mu_B H N_i}{2} - (J_{0i} + g_{0i}\mu_B H) \sigma_i^z, \quad i = 1, 2.\end{aligned}$$

Гамільтоніан, як і енергію, можна розділити на дві подібні частини, які описуються як гамільтоніан ХХ-ланцюжка з відростками на двох проміжних вузлах:

$$\begin{aligned}\hat{H}_i(\sigma_1, \sigma_2) = & g_i\mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} a_{i,n}^\dagger a_{i,n} - J_i \sum_{n=1}^{N_i-1} (a_{i,n}^\dagger a_{i,n+1} + a_{i,n+1}^\dagger a_{i,n}) - \\ & -J'_1\sigma_1 a_{i,n_1}^\dagger a_{i,n_1} - J'_2\sigma_2 a_{i,n_2}^\dagger a_{i,n_2} + E_{f,i}.\end{aligned}$$

Можна досліджувати енергетичний спектр лише одного гамільтоніану, так як частини моделі однакові за структурою (на схемі вони ніби відзеркалюють одна одну відносно домішкових zz-спінів) [16].

Розглянемо спектр стаціонарних одночастинкових станів у ХХ-ланцюжку, який має два відгалуження, під'єднані до різних внутрішніх вузлів. Основою будемо вважати вакуумний стан, у якому відсутні збудження $|0\rangle$. Для нього виконується властивість: оператор анігіляції (знищення), діючи на вакуум, дає нуль

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

Тривіальний розв'язок рівняння Шредінгера (РШ) для такого випадку має просту константну форму (енергія ферромагнітного фону):

$$\hat{H}_i|0\rangle = E_{0i}|0\rangle.$$

Побудуємо хвильову функцію, що відповідає одному перевернутому спіну (магнону). Для цього скористаємося дією операторів народження на вакуум, утворивши суперпозицію станів з магноном у кожному вузлі решітки. Підставляючи цей стан у рівняння Шредінгера, одержуємо власне рівняння.

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

Тобто хвильова функція з одним збудженням є власним станом гамільтоніана зі зсувом енергії на величину ε .

Щоб отримати систему рівнянь в скінченних різницях для хвильової функції, треба перенести оператори знищення, присутні в гамільтоніані, праворуч за допомогою фермі-антикомутаторів та скористатися властивістю вакуумного стану.

Основне рівняння:

$$(\varepsilon - h)A_n + \frac{J_i}{2}(A_{n-1} + A_{n+1}) = 0; \quad 1 < n < N_i; \quad n \neq n_1, n_2, n_3, n_4.$$

Граничні умови (далі продовжуватимемо писати для «верхнього» ланцюжка):

- оскільки ланцюжок, який ми розглядаємо, є відкритим і складається з скінченної кількості вузлів, то вузли $n = 0$; $N + 1$ відсутні:
 - ліва межа ланцюжка: $A_0 = 0$;
 - права межа ланцюжка: $A_{N+1} = 0$;
- вплив у вузлах з домішковими спінами $m = n_1; n_2$:

$$(\varepsilon - h_1 + \frac{2J_{01}}{J_1} \sigma_{n_1}) A_{n_1} + \frac{J_1}{2}(A_{n_1-1} + A_{n_1+1}) = 0;$$

$$(\varepsilon - h_2 + \frac{2J_{02}}{J_1} \sigma_{n_2}) A_{n_2} + \frac{J_1}{2}(A_{n_2-1} + A_{n_2+1}) = 0;$$

- неперервність хвильової функції: $A_{n_{1(2)}}^{left} = A_{n_{1(2)}}^{right}$.

Шукаємо частинний розв'язок основного рівняння у вигляді x^n . Після підстановки отримуємо енергетичний вираз через параметр x :

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

Загальний розв'язок основного рівняння скінченних різниць для хвильової функції:

$$A_n = \begin{cases} C_1 x^n + C_2 x^{-n}, & 1 \leq n \leq n_1; \\ C_3 x^n + C_4 x^{-n}, & n_1 \leq n \leq n_2; \\ C_5 x^n + C_6 x^{-n}, & n_2 \leq n \leq N_1. \end{cases} \quad (2.2)$$

Спершу використаємо граничні умови на кінцях ланцюжка, що дає перші співвідношення для коефіцієнтів хвильової функції

$$\begin{aligned} C_1 + C_2 &= 0; & C_1 &= -C_2; \\ C_5 x^{N_1+1} + C_6 x^{-N_1-1} &= 0; & C_5 &= -C_6 x^{-2(N_1+1)}. \end{aligned}$$

Умова неперервності у вузлах з відростками пов'язує частини розв'язку, у такий спосіб отримуємо рівняння для параметрів хвильової функції

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

Зручно розглядати пари рівнянь, що пов'язані спільними вузлами $n_{1,2}$.

У вузлі n_1 :

$$\begin{cases} C_1 \left(x^{n_1} - x^{-n_1} \right) \left(\beta_1 - \frac{x + x^{-1}}{2} \right) + \frac{1}{2} \left(C_1 \left(x^{n_1-1} - x^{1-n_1} \right) + C_3 x^{n_1+1} + C_4 x^{-n_1-1} \right) = 0; \\ C_1 \left(x^{n_1} - x^{-n_1} \right) = C_3 x^{n_1} + C_4 x^{-n_1}; \end{cases}$$

Звідси (виражаємо всі константи через одну, в нашому випадку через C_1):

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

Де перепозначили $\beta_1 = \frac{2J_{01}\sigma_{n_1}}{J_1}$.

У вузлі n_2 :

$$\begin{cases} C_5 (x^{n_2} - x^{2(N_1+1)-n_2}) \left(\beta_2 - \frac{1}{2}(x + x^{-1}) \right) + \frac{1}{2} (C_5 (x^{n_2+1} - x^{2(N_1+1)-n_2-1}) + C_3 x^{n_2-1} + C_4 x^{1-n_2}) = 0; \\ C_5 (x^{n_2} - x^{2(N_1+1)-n_2}) = C_3 x^{n_2} + C_4 x^{-n_2}; \end{cases}$$

Звідси (виражаємо всі константи через одну, в нашому випадку через C_5):

$$C_3 = C_5 \left(1 + \beta_2 \frac{x(x^{2(N_1+1)-n_2} - 1)}{x^2 - 1} \right); \quad C_4 = C_5 \left(-x^{2(N_1+1)} + \beta_2 \frac{x(x^{2(N_1+1)} - x^{2n_2})}{x^2 - 1} \right).$$

Де перепозначили $\beta_2 = \frac{2J_{02}\sigma_{n_2}}{J_1}$.

Прирівнявши вирази, що дорівнюють C_3 , отримаємо C_5 через C_1 :

$$C_5 = C_1 \left(\frac{x^2 - 1 + \beta_1 x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1 - \beta_2 x(x^{2(N_1+1)-n_2} - 1)} \right)$$

Підставляючи отримані константи у (2.2), отримуємо ХФ у вузельному зображенні для ефективного гамільтоніану ХХ-ланцюжка.

$$A_n = \begin{cases} C_1 (x^n - x^{-n}), & 1 \leq n \leq n_1; \\ C_1 \left(\left(1 + \beta_1 \frac{x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1} \right) x^n - \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1} - 1)}{x^2 - 1} \right) x^{-n} \right), & n_1 \leq n \leq n_2; \\ C_1 \frac{x^2 - 1 + \beta_1 x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1 - \beta_2 x(x^{2(N_1+1)-n_2} - 1)} (x^n - x^{2(N_1+1)-n}), & n_2 \leq n \leq N. \end{cases}$$

Щоб обчислити локальні термодинамічні характеристики, необхідно знайти нормувальний множник з $\sum_{n=1}^N |A_n|^2 = 1$:

$$\begin{aligned} |C_1|^2 & \left(\sum_{n=1}^{n_1} |x^n - x^{-n}|^2 + \sum_{n=n_1+1}^{n_2} \left| \left(1 + \beta_1 \frac{x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1} \right) x^n - \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1} - 1)}{x^2 - 1} \right) x^{-n} \right|^2 + \right. \\ & \left. + \sum_{n=n_2+1}^{N_1} \left| \frac{x^2 - 1 + \beta_1 x(1 - x^{-2n_1})}{x^2 - 1 - \beta_2 x(x^{2(N_1+1)-n_2} - 1)} (x^n - x^{2(N_1+1)-n}) \right|^2 \right) = 1. \end{aligned}$$

Звідси отримуємо вираз для модуля нормувального множника C_1 у квадраті:

$$|C_1|^2 = \left(\sum_{n=1}^{n_1} |x^n - x^{-n}|^2 + \sum_{n=n_1+1}^{n_2} \left| \left(1 + \beta_1 \frac{x(1-x^{-2n_1})}{x^2-1} \right) x^n - \left(1 + \beta_1 \frac{x(x^{2n_1}-1)}{x^2-1} \right) x^{-n} \right|^2 + \right. \\ \left. + \sum_{n=n_2+1}^{N_1} \left| \frac{x^2-1+\beta_1 x(1-x^{-2n_1})}{x^2-1-\beta_2 x(x^{2(N_1+1-n_2)}-1)} (x^n - x^{2(N_1+1-n)}) \right|^2 \right)^{-1}.$$

Отримано рівняння для параметра x , який задає енергетичний спектр станів.

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

Для дослідження появи локалізованих станів — тобто рішень з дійсним x — позбуваємося від'ємних степенів та після перетворень отримуємо:

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

Якщо довжина ланцюжка та відстань між відгалуженнями є нескінченними, дисперсійне рівняння розпадається на пару незалежних рівнянь:

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

розв'язки яких можна знайти аналітично

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

Наведено лише ті корені, які задовольняють вимогу $|x_1| < 1$, тобто відповідають локалізованим станам. Такі рішення існують при будь-яких довільно малих значеннях $J_{01,02}$.

Тепер нехай ланцюжок нескінченний, але відгалуження розташовані на скінченній відстані. Тоді дисперсійне рівняння набуває вигляду

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

Перепишемо його у більш зручній формі; виключимо тривіальні корені $x = \pm 1$

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

Тепер можна підставити критичні значення параметра $x = \pm 1$ та отримати відстань між відростками, при якій з'являються локалізовані стани:

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

Для «нижньої» частини моделі результати будуть ідентичними. На вигляді рівнянь це відобразиться лише як

$$J_{01} \rightarrow J_{03}; \quad J_{02} \rightarrow J_{04}; \quad n_1 \rightarrow n_3; \quad n_2 \rightarrow n_4; \quad \beta_1 \rightarrow \beta_3; \quad \beta_2 \rightarrow \beta_4; \quad N_1 \rightarrow N_2.$$

2.3 Моделювання

➤ Спектр стаціонарних станів

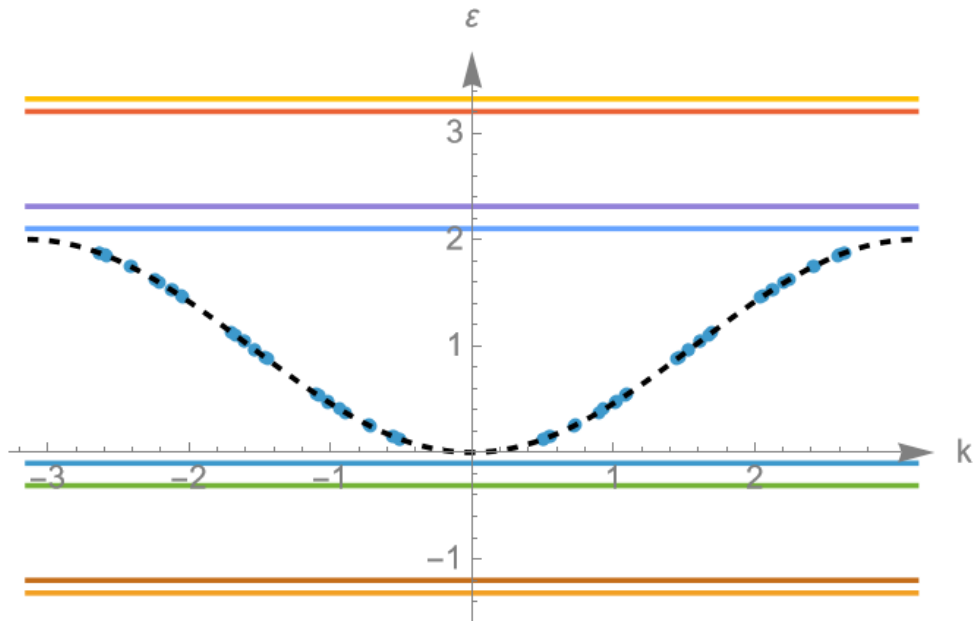


Рисунок 2.3 – Структура спектру ХХ-ланцюжка з двома відростками на проміжних вузлах при $J_i = 1$, $J_{01} = 2$, $J_{02} = 4$, $S_{1,2} = 1/2$, $N = 10$, $n_1 = 4$, $n_2 = 5$.

Графік відображає енергетичний спектр однієї горизонтальної частини моделі, де ланцюжок взаємодіє з двома додатковими спінами. Хвильові збудження ланцюга формують основну енергетичну гілку, а під'єднані спіни створюють окремі локальні стани, що розміщуються вище й нижче цього діапазону. Така структура спектра показує, як локальні зв'язки змінюють енергетику ланцюга: частина станів залишається делокалізованою вздовж ланцюжка, а частина — локалізується біля додаткових спінів, утворюючи окремі енергетичні рівні.

➤ Локальна спінова поляризація

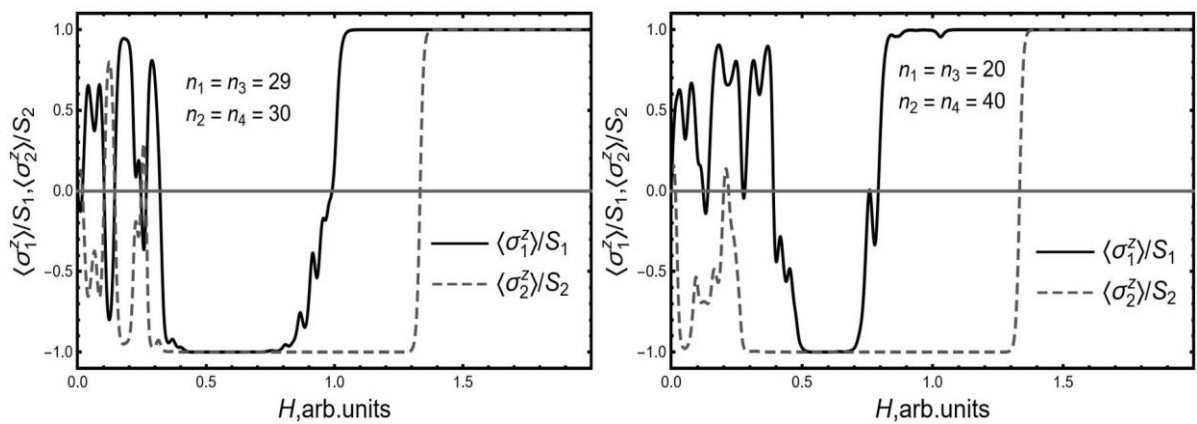
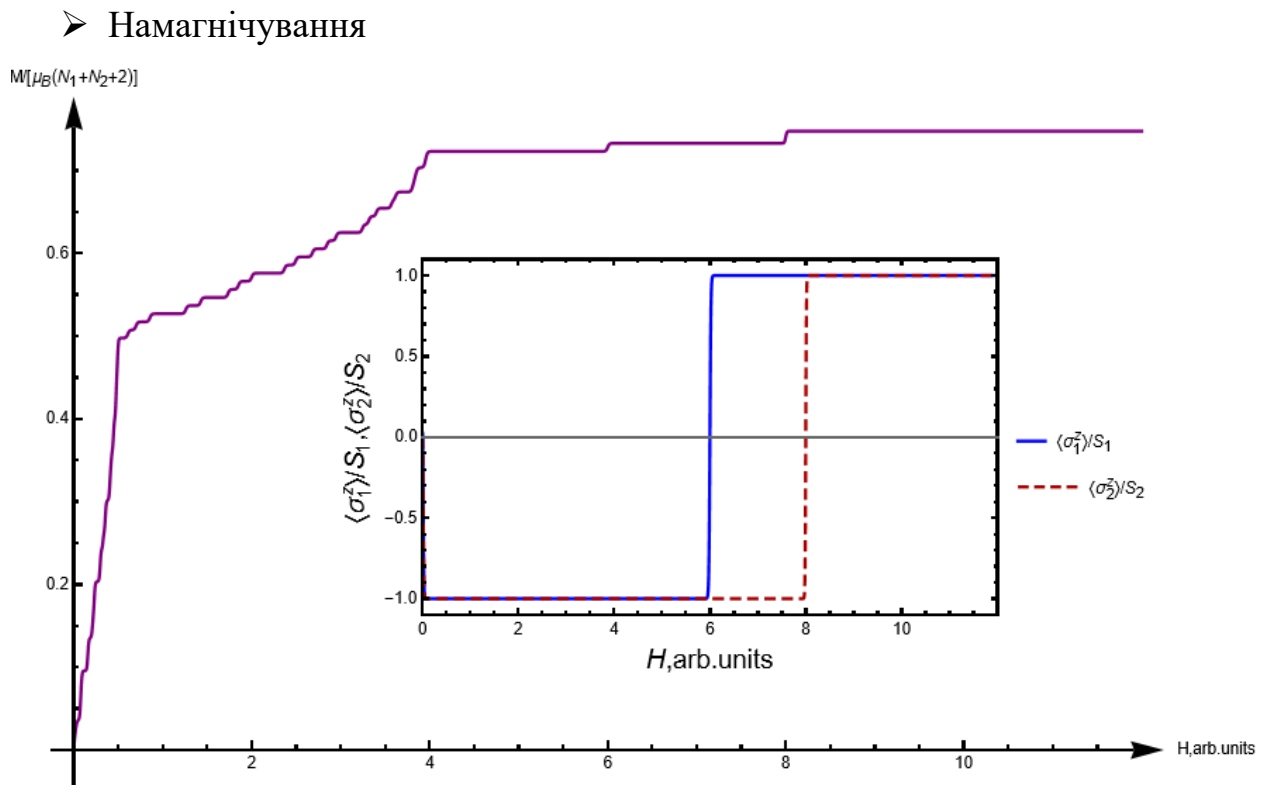


Рисунок 2.3 Залежності локальної спінової поляризації від зовнішнього поля ($T = 0.01$, $g_1 = 1$, $g_2 = 2$, $g_{01} = 1$, $g_{02} = 1.5$, $J_1/J_2 = 2$, $J_{01}/J_2 = -1$, $J_{02}/J_2 = -2$, $N_1 = N_2 = 50$).

Графіки показують, як додаткові спіни реагують на зовнішнє поле залежно від того, в яких вузлах ланцюжків вони під'єднані. Поляризація обох спінів у слабких полях має осциляційний характер — це наслідок стоячих спінових хвиль у відкритому ланцюжку; форма цих осциляцій дуже чутлива до того, наскільки близько додатковий спін розташований до країв або до іншого спіну.

У середніх полях обидва спіни вирівнюються проти поля і залишаються у стабільному стані $-S$. Коли поле збільшується, кожен додатковий спін проходить різкий фліп у стан $+S$. Положення цих переходів зміщується при зміні координат n_1, n_2 , бо локальне магнітне середовище в ланцюжку неоднорідне.



➤ Рисунок 2.4 Намагнічування як функція зовнішнього поля

$$(g_1=1, g_2=2, g_{01}=1, g_{02}=1.5, T=0.01, \frac{J_1}{J_2}=4, \frac{J_{01}}{J_2}=-6, \frac{J_{02}}{J_2}=-12, \\ N_{1,2}=50, n_{1,3}=20, n_{2,4}=40)$$

Намагнічування на графіку зростає ступенями, бо система містить два довгі ланцюжки та два додаткові спіни, приєднані локальними зв'язками. Ланцюжки поляризуються плавно, а додаткові спіни переходять між станами різної поляризації дискретно, що і дає різкі стрибки на кривій магнетизації.

На вставці показано, що перший додатковий спін вирівнюється вздовж зовнішнього поля при $H \approx 6$, тоді як другий — при сильнішому полі $H \approx 8$. Це пов'язано з тим, що ці спіни мають різні локальні взаємодії зі своїми ланцюжками, тому пороги їхнього переорієнтування не співпадають. Кожен такий фліп збільшує магнетизацію на фіксовану величину, утворюючи «сходишки».

За високих полів усі спіни вирівнюються вздовж поля, і магнетизація насичується.

РОЗДІЛ 3

XX-ЛАНЦЮЖКИ, ПОЄДНАНІ ЧЕРЕЗ ДВА ZZ-СПІНИ

3.1 Гамільтоніан двох XX-ланцюжків, поєднаних двома zz-спінами

Розглянемо модель XX-ланцюжків, поєднаних через zz-декоруючі спіни, додаткові спіни впливають на один й той самий спін в кожному з ланцюжків (спрощений варіант моделі з попереднього розділу), схематичний вигляд якої наведено на рис. 3.1.

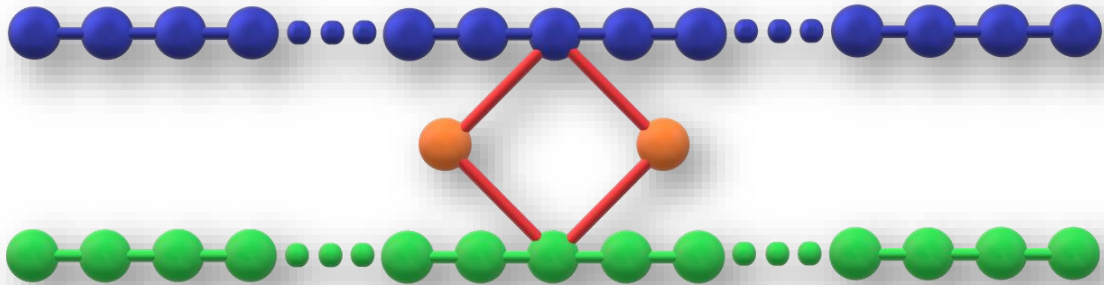


Рис 3.1 Модель скінченних XX-ланцюжків, поєднаних Ізінгівськими спінами

Гамільтоніан такої системи:

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^N S_{1,n}^z - J_1 \sum_{n=1}^{N-1} (S_{1,n}^x S_{1,n+1}^x + S_{1,n}^y S_{1,n+1}^y) - \\ & -g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^N S_{2,n}^z - J_2 \sum_{n=1}^{N-1} (S_{2,n}^x S_{2,n+1}^x + S_{2,n}^y S_{2,n+1}^y) - \\ & -g_{01} \mu_B H \sigma_1^z - g_{02} \mu_B H \sigma_2^z - (J_{01} \sigma_1^z + J_{02} \sigma_2^z) (S_{1,n_0}^z + S_{2,n_0}^z). \end{aligned}$$

Так само за допомогою перетворень $S^x, S^y, S^z \rightarrow S^+, S^- \rightarrow a_n^\dagger, a_n$ [4, 8] перейдемо до запису через оператори породження та знищення. Отримаємо

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -\frac{\mu_B H N}{2} (g_1 + g_2) - \mu_B H (g_{01} \sigma_1^z + g_{02} \sigma_2^z) - J_{01} \sigma_1^z - J_{02} \sigma_2^z - \\ & - g_1 \mu_B H \sum_{n=1}^N a_{1,n}^\dagger a_{1,n} - \frac{J_1}{2} \sum_{n=1}^{N-1} (a_{1,n+1}^\dagger a_{1,n} + a_{1,n}^\dagger a_{1,n+1}) - g_2 \mu_B H \sum_{n=1}^N a_{2,n}^\dagger a_{2,n} - \\ & - \frac{J_2}{2} \sum_{n=1}^{N-1} (a_{2,n+1}^\dagger a_{2,n} + a_{2,n}^\dagger a_{2,n+1}) + (J_{01} \sigma_1^z + J_{02} \sigma_2^z) (a_{1,n_0}^\dagger a_{1,n_0} + a_{2,n_0}^\dagger a_{2,n_0}). \end{aligned}$$

3.2 Розрахунки

- Стан без збуджень $|0\rangle$:

$$a_n |0\rangle = 0, \quad n=1, \dots, N; \quad \hat{\mathbf{H}}_1 |0\rangle = E_{1, ferro} |0\rangle.$$

- Стан з одним збудженням $|1\rangle$ будемо як

$$\hat{\mathbf{H}}_1 |1\rangle = \varepsilon |1\rangle, \quad |1\rangle = \sum_{m=1}^{N_i} A_m a_m^\dagger |0\rangle.$$

Вигляд основного рівняння для амплітуд:

$$A_m (\varepsilon + g_i \mu_B H) + \frac{J_i}{2} (A_{m-1} + A_{m+1}) = 0 \quad 2 \leq m \leq N-1, \quad m \neq n_0$$

Граничні умови:

- Ланцюжок є відкритим і скінченним, тож вузли $n=0$; $N+1$ відсутні:

$$A_0 = 0; \quad A_{N+1} = 0;$$

- неперервність хвильової функції:

$$A_{n_0}^{left} = A_{n_0}^{right};$$

- вплив у вузлі з домішковим спіном $m = n_0$:

$$A_{n_0} (\varepsilon - g_i \mu_B H - J_{01} \sigma_1^z - J_{02} \sigma_2^z) + \frac{J_i}{2} (A_{n_0-1} + A_{n_0+1}) = 0. \quad (3.1)$$

Шукаємо розв'язок у вигляді $A_m = x^m$, після підстановки маємо

$$x^m (\varepsilon - g_i \mu_B H) + \frac{J_i}{2} (x^{m-1} + x^{m+1}) = 0$$

Звідси енергія магнону, виражена за допомогою параметра x :

$$\varepsilon = g_i \mu_B H - \frac{J_i}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right)$$

Шукаємо розв'язки з урахуванням граничних умов

$$A_m = \begin{cases} C_1 x^m + C_2 x^{-m}, & 1 \leq m \leq n_0; \\ C_3 x^m + C_4 x^{-m}, & n_0 \leq m \leq N. \end{cases} \quad (3.2)$$

Узгодження у вузлі n_0 :

$$C_1 x^{n_0} + C_2 x^{-n_0} = C_3 x^{n_0} + C_4 x^{-n_0}$$

З граничних умов на кінцях ланцюжка випливає такий взаємозв'язок констант:

$$\begin{aligned} A_0 = C_1 + C_2 = 0 & \rightarrow C_1 = -C_2; \\ A_{N+1} = C_3 x^{N+1} + C_4 x^{-(N+1)} & \rightarrow C_3 = -C_4 x^{-2(N+1)}. \end{aligned}$$

Виразимо всі константи через одну, а саме через C_1 :

$$C_2 = -C_1; \quad C_3 = C_1 \frac{x^{n_0} - x^{-n_0}}{x^{n_0} - x^{2(N+1)-n_0}}; \quad C_4 = -C_1 \frac{x^{n_0} - x^{-n_0}}{x^{n_0-2(N+1)} - x^{-n_0}}.$$

Підставляючи усе це в (3.1), отримаємо

$$\left(\frac{2I_1 \sigma_1}{J_i} + \frac{2I_2 \sigma_2}{J_i} \right) (x^{n_0} - x^{-n_0}) + (x^{n_0+1} - x^{-n_0-1}) - \frac{(x^{n_0} - x^{-n_0})(x^{n_0+1} - x^{2(N+1)-n_0-1})}{x^{n_0} - x^{2(N+1)-n_0}} = 0;$$

Проводимо заміну $\alpha = \frac{2I_1 \sigma_1}{J_i}$; $\beta = \frac{2I_2 \sigma_2}{J_i}$:

$$(\alpha + \beta)(x^{n_0} - x^{-n_0}) + (x^{n_0+1} - x^{-n_0-1}) - \frac{(x^{n_0} - x^{-n_0})(x^{n_0+1} - x^{2(N+1)-n_0-1})}{x^{n_0} - x^{2(N+1)-n_0}} = 0;$$

Провівши алгебраїчні перетворення, маємо рівняння для параметра x , що задає енергетичний спектр станів:

$$x(\alpha + \beta)(1 - x^{2n_0})(1 - x^{2(N+1)-n_0}) - (1 - x^2)(1 - x^{2(N+1)}) = 0; \quad (3.3)$$

Підставляємо в (3.2) отримані константи:

$$A_m = \begin{cases} C_1 (x^m - x^{-m}), & 1 \leq m \leq n_0; \\ C_1 \left(1 + \frac{(1 - x^{-2n_0})(\alpha + \beta)}{x - x^{-1}} \right) x^m - C_1 \left(1 + \frac{(x^{2n_0} - 1)(\alpha + \beta)}{x - x^{-1}} \right) x^{-m}, & n_0 \leq m \leq N. \end{cases}$$

Шукаємо нормувальний множник для хвильової функції:

$$\sum_{m=1}^N |A_m|^2 = 1;$$

$$|C_1|^2 \sum_{m=1}^{n_0} |(x^m - x^{-m})|^2 + \sum_{m=n_0+1}^N \left| \left(1 + \frac{(1 - x^{-2n_0})(\alpha + \beta)}{x - x^{-1}} \right) x^m - \left(1 + \frac{(x^{2n_0} - 1)(\alpha + \beta)}{x - x^{-1}} \right) x^{-m} \right|^2 = 1$$

$$|C_1| = \sqrt{\left(\sum_{m=1}^{n_0} |(x^m - x^{-m})|^2 + \sum_{m=n_0+1}^N \left| \left(1 + \frac{(1 - x^{-2n_0})(\alpha + \beta)}{x - x^{-1}} \right) x^m - \left(1 + \frac{(x^{2n_0} - 1)(\alpha + \beta)}{x - x^{-1}} \right) x^{-m} \right|^2 \right)^{-1}}$$

Перехід до границі $N \rightarrow \infty$: рівняння (3.3) у границі нескінченного ланцюжка суттєво спрощується. Для локалізованого стану $|x| < 1$, тому

$$x^{2(N+1)} \rightarrow 0 \quad (N \rightarrow \infty).$$

Отже рівняння набуває вигляду $x(\alpha + \beta)(1 - x^{2n_0}) = 1 - x^2$.

Це основне рівняння для визначення можливих локалізованих станів у нескінченному ланцюжку. У нескінченному ланцюжку зникають ефекти країв і залишається лише вплив домішки (точкового спінового дефекту).

3.3 Моделювання

➤ Енергетичний спектр

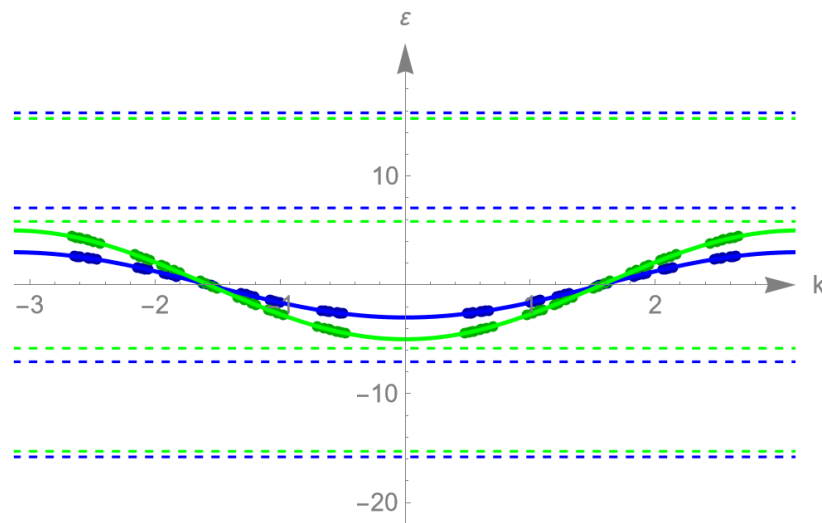


Рисунок 3.2 Структура спектру системи при $J_1 = 3K$; $J_2 = 5K$;

$$J'_1 = 10K; J'_2 = 20K; S_1 = S_2 = \frac{1}{2}; n_0 = 5; N_1 = 10; H = 0.$$

Графік показує енергетичні спектри двох спінових ланцюгів (синя й зелена криві), між якими існує локальне з'єднання. Через це з'єднання дисперсія відхиляється від звичайної косинусної форми, а дозволені рівні зміщуються. Ланцюг із більшим J має ширший спектр, тому зелена крива розтягнутіша. Горизонтальні пунктирні лінії відповідають високим локалізованим енергетичним станам, які не належать до хвильових збуджень ланцюгів.

➤ Теплоємність

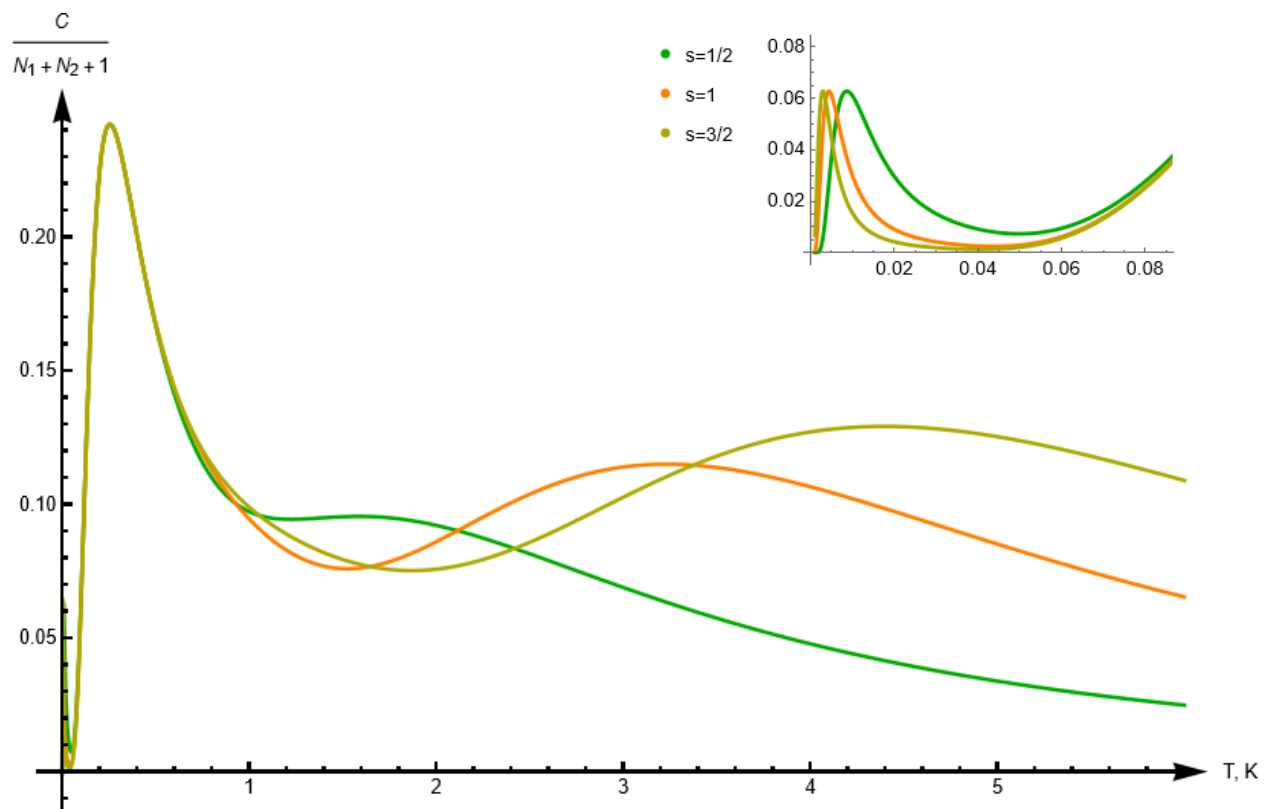


Рисунок 3.3 Теплоємність системи з різними значеннями zz -спіна при $H = 0$, $g_1 = 1$, $g_2 = 1$, $g_{01} = 1.2$, $g_{02} = 1.3$, $J_1/J_2 = 1$, $J_{01}/J_2 = 10$, $J_{02}/J_2 = 2$, $N_{1,2} = 6$, $n_i = 3$.

Усі три криві мають виражений максимум теплоємності при низьких температурах. Такий максимум ідентифікується як пік Шотткі, який виникає коли населення кількох найближчих енергетичних рівнів швидко змінюється при підвищенні температури.

РОЗДІЛ 4

ЧОТИРИ ХХ-ЛАНЦЮЖКИ, ПОЄДНАНІ ZZ-СПІНОМ

4.1 Гамільтоніан ХХ-ланцюжків, поєднані zz-спіном

Розглядається система з 4 спінових ланцюжків, приєднаних до центрального домішкового zz-спіна. Нехай у i -му ланцюжку N_i спінів, магнітне поле H направлене вздовж z .

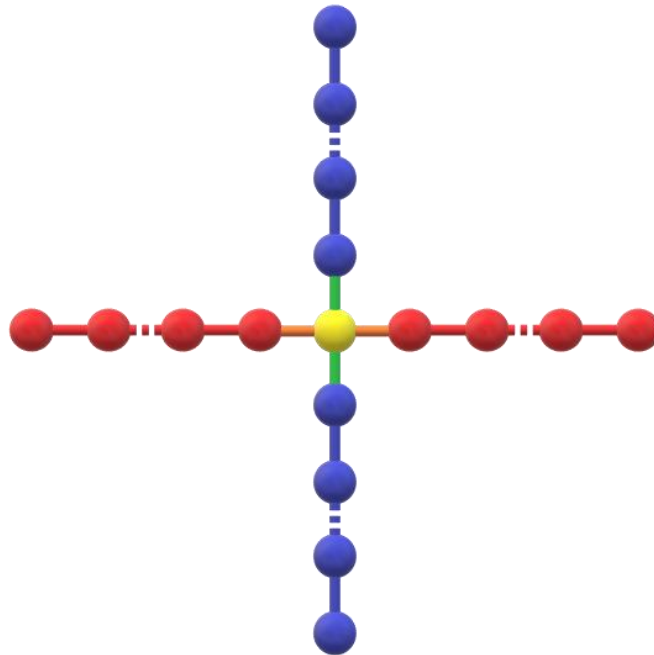


Рис 4.1 Модель чотирьох скінченних ХХ-ланцюжків, поєднаних Ізингівським спіном

Повний гамільтоніан у спіновому представленні

$$\mathbf{H} = - \sum_{i=1}^4 \left[g_i \mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} S_{i,n}^z + J_i \sum_{n=1}^{N_i-1} (S_{i,n}^x S_{i,n+1}^x + S_{i,n}^y S_{i,n+1}^y) - \sigma_0^z J_{0i} S_{i,n_i}^z \right]$$

де:

- $i = 1, 2, 3, 4$ — чотири плеча «хрестоподібної» системи;
- n — номер спіна в ланцюжку, ланцюжок «росте від хвоста до центра»;

- $g_i \mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} S_i^z$ — Зееманівська взаємодія (взаємодія з зовнішнім полем);
- J_i — обмін між сусідніми спінами в кожній підґратці;
- J_0 з множником σ_0 — взаємодія з центральним спіном.

4.2 Розрахунки

➤ Перетворення гамільтоніану частини моделі

$$\mathbf{H}(\sigma) = - \sum_{i=1}^4 \left[g_i \mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} \left(\frac{1}{2} - a_{i,n}^\dagger a_{i,n} \right) + J_i \sum_{n=1}^{N_i-1} \left(a_{i,n}^\dagger a_{i,n+1} + a_{i,n}^\dagger a_{i,n+1} \right) - J_{0i} \sigma \left(2 - a_{i,N_i}^\dagger a_{i,N_i} \right) \right] - g_0 \mu_B \sigma H;$$

Ферромагнітна енергія основного стану (немає магнонів $a^\dagger a = 0$):

$$E_{ferro} = - \sum_{i=1}^4 \left(\frac{g_i \mu_B H N_i}{2} + 2 J_{0i} \sigma \right) - g_0 \mu_B \sigma H.$$

Для одного ланцюжка маємо

$$\mathbf{H}(\sigma) = g_i \mu_B H \sum_{n=1}^{N_i} a_{i,n}^\dagger a_{i,n} + J_i \sum_{n=1}^{N_i-1} \left(a_{i,n}^\dagger a_{i,n+1} + a_{i,n}^\dagger a_{i,n+1} \right) - J_{0i} \sigma a_{i,N_i}^\dagger a_{i,N_i} + E_{ferro}$$

➤ Рівняння руху для однієї підґратки

Для внутрішніх вузлів $n = 2, \dots, N_1 - 1$:

$$(\varepsilon - g_i \mu_B H) U_n + \frac{J_i}{2} (U_{n+1} + U_{n-1}) = 0 \quad (4.1)$$

з граничними умовами:

1. для хвоста ланцюжка: $U_0 = 0$;
2. на домішковому вузлі:

$$(\varepsilon - g_i \mu_B H - J_{0i} \sigma) U_{N_i} + \frac{J_i}{2} U_{N_i-1} = 0; \quad i = 1, \dots, 4.$$

Шукаємо розв'язок вигляду

$$U_m = C_1 x^m + C_2 x^{-m} \quad (4.2)$$

З першої граничної умови отримуємо залежність коефіцієнтів:

$$C_1 + C_2 = 0; \quad C_1 = -C_2.$$

Підставляючи їх назад у (4.2), маємо

$$U_m = C_1 (x^m - x^{-m})$$

Тепер використаємо другу граничну умову. Підставивши розв'язки при $m = N_{i-1}$; N_i маємо

$$(\varepsilon - g_i \mu_B H - J_{0i} \sigma) (x^{N_i} - x^{-N_i}) + \frac{J_i}{2} (x^{N_i-1} - x^{1-N_i}) = 0; \quad (4.3)$$

Використаємо дисперсію. З рівняння всередині ланцюжка (4.1) при $U_n = x^n$ маємо

$$\varepsilon = g_i \mu_B H - \frac{J_i}{2} (x + x^{-1}) \quad (4.4)$$

Підставляючи (4.4) в (4.3), отримаємо

$$\left(-\frac{J_i}{2} (x + x^{-1}) - J_{0i} \sigma \right) (x^{N_i} - x^{-N_i}) + \frac{J_i}{2} (x^{N_i-1} - x^{1-N_i}) = 0;$$

Поділивши на $-\frac{J_i}{2}$ та здійснюючи заміну $\frac{2J_{0i}\sigma}{J_i} = \alpha$, маємо

$$(x + x^{-1} + \alpha) (x^{N_i} - x^{-N_i}) - (x^{N_i-1} - x^{1-N_i}) = 0;$$

За допомогою звичайних алгебраїчних перетворень отримуємо

$$\left(x^{2(1+N_i)} - 1\right) + \alpha x \left(x^{2N_i} - 1\right) = 0;$$

➤ Фізичний зміст параметрів

Параметр x [12-15] визначає просторову поведінку магنونного збудження:

- $|x| = 1$ відповідає поширеним хвильовим станам;
- $|x| < 1$ відповідає експоненційно локалізованим станам.

Довжина локалізації визначається співвідношенням

$$\xi = \frac{1}{\ln|x|}$$

Параметр α характеризує силу взаємодії магнона з домішковим спіном. При

- $|\alpha| \gg 1$ домішка домінує і формується глибоко локалізований стан,
- $|\alpha| \ll 1$ вплив домішки є слабким.

➤ Умова появи зв'язаного магنونного стану

Граничну умову для параметра x , отриману з характеристичного рівняння, зручно переписати у вигляді

$$\left(1 - x^2\right)\left(1 + x^2 + \dots + x^{2N_i}\right) + \alpha x \left(1 - x^2\right)\left(1 + x^2 + \dots + x^{2(N_i-1)}\right) = 0; \quad (4.5)$$

Припустимо, що маємо режим $|x| \rightarrow 1$, тобто локалізація слабка. Підставляємо асимптотику у рівняння (4.5).

У слабо локалізованому випадку обидві суми добре апроксимуються кількістю членів, бо всі доданки близькі до 1.

$$1 + x^2 + \dots + x^{2N_i} \approx N_i + 1$$

$$1 + x^2 + \dots + x^{2(N_i-1)} \approx N_i;$$

Тоді (4.5) зводиться до лінійного співвідношення та записується як:

$$N_i + 1 + \alpha x N_i = 0;$$

Знову ж таки, при слабкій локалізації $|x| \rightarrow 1$, отримуємо

$$N_i + 1 = -\alpha N_i$$

Звідси безпосередньо випливає умова появи зв'язаного магнонного стану:

$$\left| \frac{2J_0\sigma}{J_i} \right| = \frac{N_i + 1}{N_i}$$

Це співвідношення визначає критичну силу взаємодії з домішкою, за якої локалізований магнон вперше відокремлюється від зони поширених магнонних станів.

➤ Точний розв'язок у границі нескінченного ланцюжка

Розглянемо границю нескінченного ланцюжка $N \rightarrow \infty$, яка відповідає фізично реалістичній ситуації, коли довжина ланцюжка значно перевищує характерну довжину локалізації магнонного стану. У цьому випадку для локалізованих розв'язків з $|x| < 1$ виконуються границі

$$\lim_{N \rightarrow \infty} x^{2N_i} = \lim_{N \rightarrow \infty} x^{2(N_i+1)} = 0,$$

що дозволяє знехтувати крайовими внесками в характеристичному рівнянні.

За цих умов воно спрощується до

$$1 - \alpha x = 0,$$

звідки безпосередньо отримуємо

$$x = \frac{1}{\alpha}.$$

Підставляючи це значення у дисперсійне співвідношення, знаходимо енергію локалізованого магنونного стану

$$\varepsilon = g\mu_B H - \frac{J}{2} \left(\alpha + \frac{1}{\alpha} \right).$$

З урахуванням означення параметра α енергія може бути записана у вигляді

$$\varepsilon = g\mu_B H - J_0 \sigma - \frac{J^2}{4J_0 \sigma},$$

що демонструє появу дискретного рівня, відокремленого від магنونної зони чистого ланцюжка.

- Точний аналіз характеристичного рівняння та енергії локалізованого магنونного стану

Розглянемо узагальнене характеристичне рівняння, яке виникає при дослідженні одночастинкових магنونних збуджень у скінченному ХХ - ланцюжку з домішковим спіном, розташованим у вузлі n_0 :

$$\alpha_i x (1 - x^{2(N+1-n_0)}) (1 - x^{2n_0}) + (1 - x^2) (1 - x^{2(N+1)}) = 0.$$

Множники $(1 - x^{2n_0})$ та $(1 - x^{2(N+1-n_0)})$ відповідають обмеженості хвильової функції відповідно ліворуч і праворуч від домішки, $(1 - x^{2(N+1)})$ виникає внаслідок граничної умови на кінці скінченного ланцюжка.

- Критична умова виникнення локалізованого стану

Для аналізу умови появи зв'язаного (локалізованого) магنونного стану розглянемо режим слабкої локалізації, коли $|x| \rightarrow 1$. У цьому випадку всі степеневі суми, що входять до характеристичного рівняння, можуть бути апроксимовані кількістю своїх доданків, як і в (4.5).

У результаті характеристичне рівняння зводиться до лінійного співвідношення

$$\pm\alpha_i(N+1+n_0)n_0-(N+1)=0,$$

звідки безпосередньо отримується критичне значення параметра домішкової взаємодії:

$$|\alpha_i| = \frac{(N+1+n_0)n_0}{N+1}.$$

Це співвідношення визначає критичну силу взаємодії з домішкою, за якої локалізований магنونний стан відокремлюється від зони поширених магنونних збуджень. На відміну від симетричного випадку, критичне значення α_i істотно залежить від положення домішкового спіну n_0 у ланцюжку.

➤ Точний розв'язок для параметра локалізації

Для отримання точного розв'язку без використання асимптотичних наближень розглянемо рівняння, яке випливає з характеристичної умови у випадку локалізованого стану:

$$x^2 - \alpha_i x - 1 = 0.$$

Його розв'язки мають вигляд

$$x_{\pm} = \frac{\alpha_i}{2} \pm \sqrt{\frac{\alpha_i^2}{4} + 1}.$$

Оскільки локалізований стан відповідає експоненційно спадаючій хвильовій функції, необхідно виконання умови $|x| < 1$, тому фізично допустимий корінь:

$$-1 < x_- = \frac{\alpha_i}{2} - \sqrt{\frac{\alpha_i^2}{4} + 1} < 0.$$

Отримане значення параметра x описує знакозмінну експоненційно локалізовану магنونну хвилю, зосереджену поблизу домішкового вузла.

➤ Енергія локалізованого магنونного стану

Енергія одночастинкового магнетонного збудження визначається дисперсійним співвідношенням ХХ-ланцюжка:

$$\varepsilon = g\mu_B H - \frac{J}{2} \left(x + \frac{1}{x} \right).$$

Підставляючи знайдений допустимий корінь x_+ у це співвідношення та виконуючи алгебраїчні перетворення, отримуємо точний вираз для енергії локалізованого стану:

$$\varepsilon = g\mu_B H + J \sqrt{\frac{\alpha_i^2}{4} + 1}.$$

Цей результат описує дискретний рівень енергії, який відокремлюється від магнетонної зони чистого ланцюжка. У границі сильної домішкової взаємодії $|\alpha| \gg 1$ наведений вираз узгоджується з результатами, отриманими раніше для нескінченного ланцюжка, що підтверджує коректність проведеного аналізу.

4.3 Моделювання

➤ Енергетичний спектр

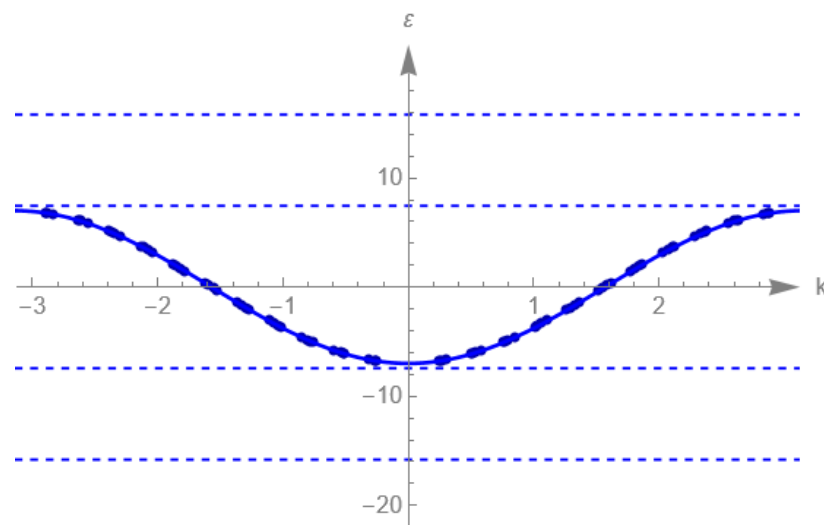


Рисунок 4.2 Енергетичний спектр спінових збуджень одного з ланцюжків моделі, при $J_i = 7$, $J_{oi} = -10$, $N_i = 12$, $S = 3/2$.

Графік показує дисперсію спінового ланцюжка з врахуванням локального приєднання до центрального вузла. Основна хвилеподібна крива відповідає низькоенергетичним станам ланцюга, які дещо викривлені через взаємодію з центральним спіном.

Високі горизонтальні рівні — це локалізовані енергетичні стани, що виникають через сильний зв'язок J_{0i} , і не належать до хвильових збуджень самого ланцюга.

➤ Поляризація в слабкому полі при низьких температурах

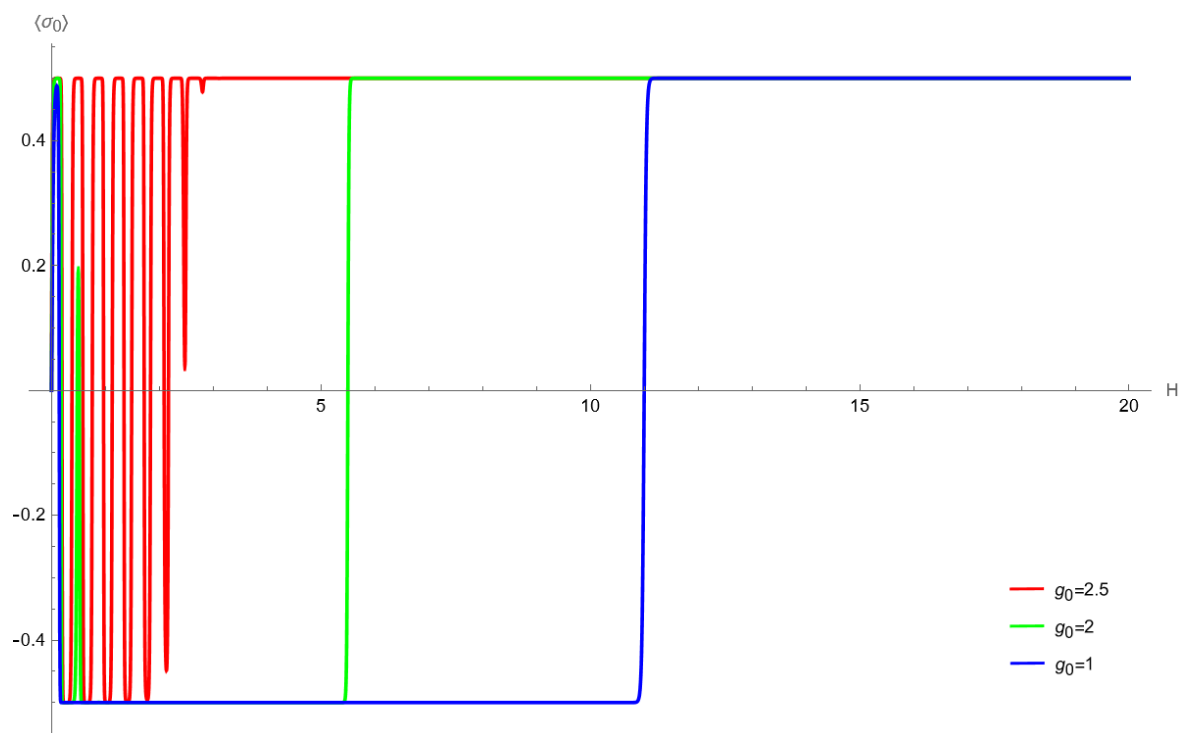


Рисунок 4.3 Перемагнічування в слабкому полі при зміні g-фактора ізіговського спіна при низькій температурі $T = 0.02K$ при $S = 1/2$, $N_i = 40$, $g_i = 2$, $J_i = 10$, $J_{01} = J_{02} = -8$; $J_{03} = J_{04} = -3$.

На рис. (4.3) показано, як змінюється поляризація центрального додаткового спіну залежно від зовнішнього поля та його g-фактора. Для великих g_0 центральний спін стає дуже чутливим до збурень від чотирьох ланцюгів, тому у слабких полях виникають виразні осциляції поляризації. При зменшенні g_0 ці осциляції згладжуються і практично зникають, а поведінка

стає монотонною: спін здійснює лише один різкий перехід зі стану $-S$ у $+S$ при відповідному критичному полі.

Критичне поле фліпу зміщується: чим більший g_0 , тим менше поле потрібно для перемагнічування, що є наслідком різної сили Зееманівської взаємодії.

➤ Намагніченість

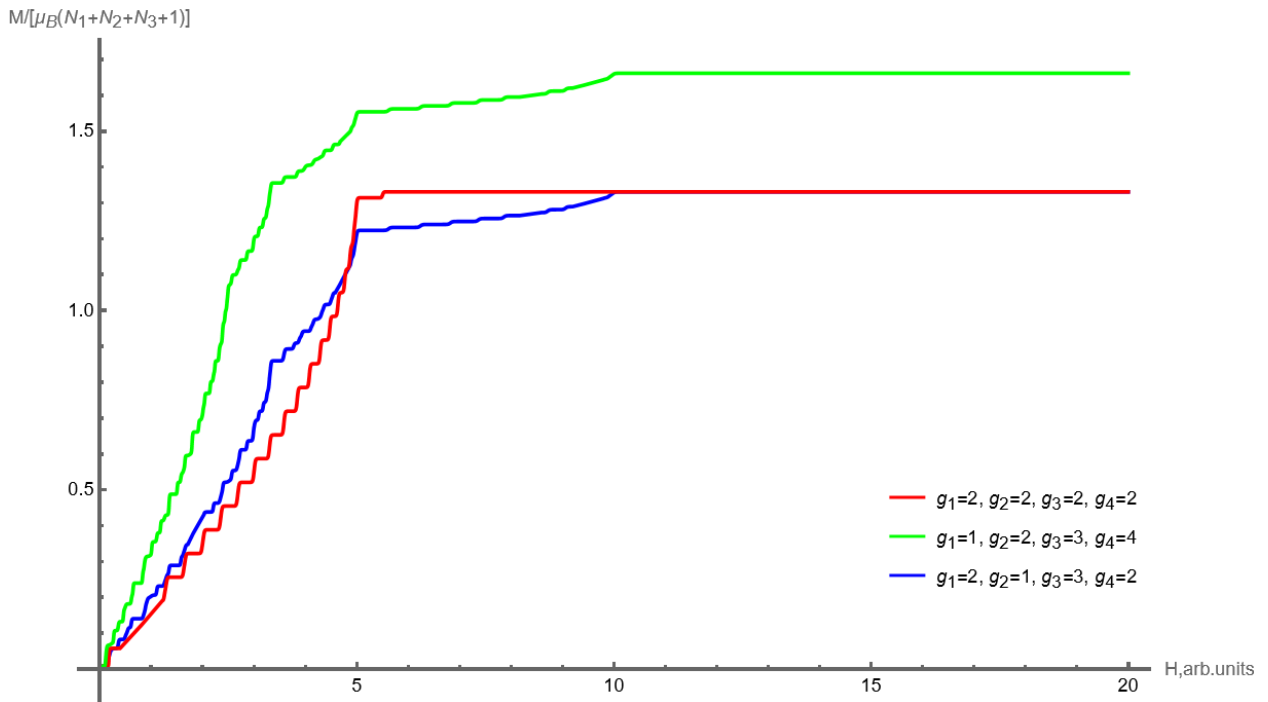


Рисунок 4.4 Вплив g -факторів ланцюгів на криву магнетизації при $T = 0.02\text{ K}$,
 $S = 1/2$, $N_i = 40$, $g_i = 2$, $J_i = 10$, $J_{01} = J_{02} = -8$; $J_{03} = J_{04} = -3$.

Рис (4.4) показує, як намагніченість змінюється при варіації g -факторів у різних ланцюжках, з'єднаних із центральним додатковим спіном. Ланцюжки з більшими g -факторами легше поляризуються зовнішнім полем, тому намагніченість зростає швидше та досягає вищого рівня. Якщо всі g однакові, намагніченість зростає рівномірно. Комбіновані значення g дають проміжну поведінку.

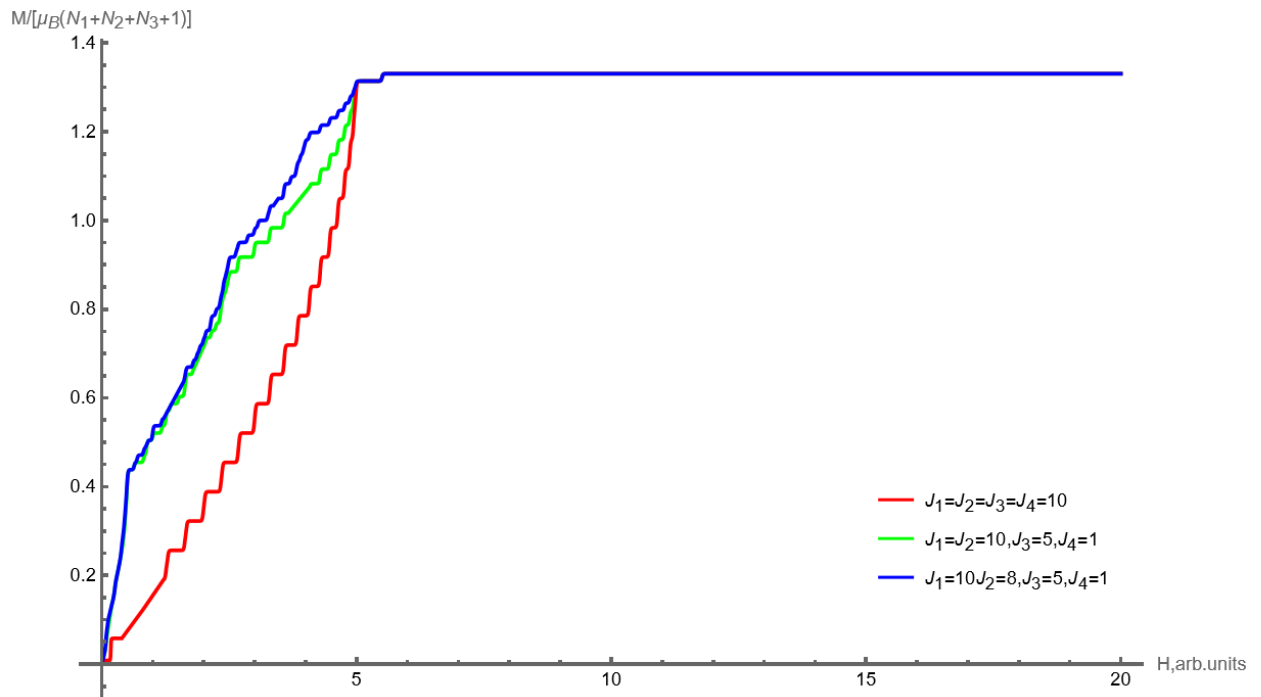


Рисунок 4.5 Вплив обмінних взаємодій ланцюжків на криву намагніченості при $T = 0.02K$, $S = 1/2$, $N_i = 40$, $g_i = 2$, $J_{01} = J_{02} = -8$; $J_{03} = J_{04} = -3$.

Графік на рис. (4.5) демонструє, як намагніченість системи з кількох спінових ланцюжків залежить від величин обмінних взаємодій. Якщо всі ланцюжки мають велике значення J_i , намагніченість зростає найповільніше, оскільки сильна спінова кореляція пригнічує вирівнювання спінів полем. Коли частина ланцюжків має менші J_i , то вони поляризуються легше, тому загальна намагніченість зростає швидше у слабких і середніх полях. Кінцеве значення намагніченості однакове для всіх випадків, оскільки за достатньо сильного поля всі спіни незалежно від J_i вирівнюються.

➤ Теплоємність

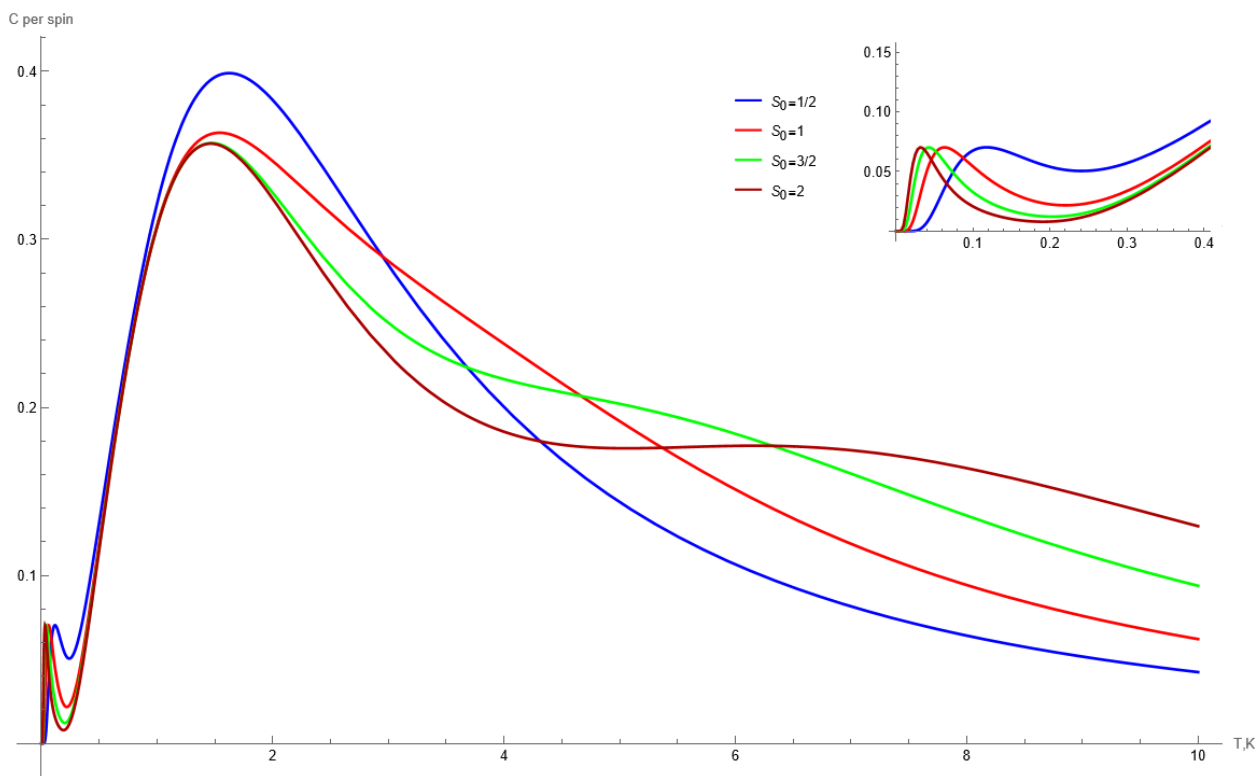


Рисунок 4.6 Зміна теплоємності з температурою для системи з різним спіном центрального вузла при $N_i = 8K$; $g_i = 2$; $g_0 = 2.5$; $J_{0i} = -10K$; $J_i = 5K$.

Графік показує, як змінюється теплоємність на один спін у системі, коли спін центрального вузла приймає різні значення. Усі криві мають два максимуми, що відповідають:

- локальним збудженням центрального спіну (низькотемпературний пік);
- колективним збудженням ланцюжків (високотемпературний пік).

За меншого S_0 низькотемпературний максимум більший і різкіший, тому що енергетичний рівень локального спіну має більший вплив на систему. За більшого S_0 цей максимум згладжується, бо спектр локальних рівнів стає розширеним і вплив центрального спіну на низькотемпературну теплоємність слабшає.

ВИСНОВКИ

У даній роботі було проведено комплексне теоретичне дослідження низьковимірних квантових спінових систем на основі скінченних ХХ-ланцюжків із додатковими ізінгівськими домішковими спінами. Дослідження виконувалося послідовно — від аналізу базових одновимірних спінових моделей до побудови та вивчення складних мезоскопічних систем зі змішаною ХХ–ZZ взаємодією.

На початковому етапі було виконано аналіз сучасної наукової літератури, присвяченої одновимірним квантовим спіновим моделям, з особливим акцентом на ХУ- та ХХ-ланцюжки з додатковими взаємодіями та ізінгівськими домішками. На основі цього аналізу сформовано теоретичну базу дослідження та підготовлено огляд літературних джерел.

Побудовано та проаналізовано моделі кількох скінченних ХХ-ланцюжків, з'єднаних через додаткові ізінгівські спіни. Для досліджуваних систем отримано дискретизовані рівняння з відповідними граничними умовами та виконано нормування власних станів.

Аналітично досліджено одночастинковий енергетичний спектр скінченних ХХ-ланцюжків із ZZ-домішками. Показано, що ізінгівські взаємодії суттєво змінюють спектр і можуть призводити до появи локалізованих домішкових рівнів.

Розроблено та реалізовано чисельні алгоритми для моделювання термодинамічних характеристик системи. Проведено чисельні розрахунки польових і температурних залежностей намагніченості та теплоємності, виявлено появу додаткових стрибків намагніченості та максимумів теплоємності, пов'язаних з антиферомагнітними ізінгівськими взаємодіями.

Отримані результати свідчать про те, що додаткові ізінгівські спіни та складна топологія спінових зв'язків відіграють визначальну роль у формуванні спектральних і термодинамічних властивостей низьковимірних магнітних

систем. Запропонований підхід та отримані результати можуть бути використані для подальших теоретичних досліджень і для наближеного опису реальних квазіодновимірних магнітних матеріалів.

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

Тези були опубліковані в [17].

Назва доповіді:

Magnetic Properties of Two Finite spin-1/2 XX Chains Connected through Two Ising spins.

Автори:

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

СПИСОК ВИКОРИСТАНИХ ДЖЕРЕЛ

1. Sutherland B. Beautiful Models. 70 Years of Exactly Solved Many-Body Problems / B. Sutherland // World Scientific Publishing, Singapore. – 2004. – P. 381.
2. 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.
3. Andrei N. Diagonalization of the Kondo Hamiltonian / N. Andrei // Phys. Rev. Lett. – 1980. – V. 45. – P. 379.
4. 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.
5. Ising E. Beitrag zur theorie des ferromagnetismus / E. Ising // Z.Phys. – 1925. – V. 31. – P. 253 – 258.
6. Derzhko O. There is life in the old horse yet or what else we can learn studying spin-1/2 XY chains / O. Derzhko // Condensed Matter Physics. – 2003. – P. 729–749.
7. Kenzelmann M. Order to disorder transition in the XY-like quantum magnet Cs_2CoCl_4 induced by noncommuting applied fields / M. Kenzelmann, R. Coldea, D.A. Tennant, D. Visser, M. Hofmann, P. Smeibidl, Z. Tylczynski // Phys. Rev. B. – 2002. – V. 65. – P. 144432.
8. Mattis D. The Theory of Magnetism Made Simple / D. Mattis // World Scientific Publishing. – 2006. – P. 580.
9. Fradkin E. Field theories of condensed matter physics / E. Fradkin. // Cambridge University Press. – 2013. – V. 2. – P. 838.
10. Dirac. P.A.M. Quantum Mechanics of Many-Electron Systems / P.A.M. Dirac // Proc. R. Soc. Lond. – 1929. – V.123. – P. 714-733.

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. Ezerskaya E.V. The Energy Spectrum and Thermodynamics of Spin-1/2 XX Chain with Ising Impurities / E.V. Ezerskaya // Acta Physica Polonica A. – 2017. – V. 131, №4. – P. 928–930.
16. 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.
17. Dzhenzherova K.S., Ezerskaya E.V. , Kovalenko V.O. / Magnetic Properties of Two Finite spin-1/2 XX Chains Connected through Two Ising spins. // Condensed matter & low-temperature physic. Conference Program & Book of Abstracts. – 2025. – P. 185.