

Низкотемпературные свойства конечных XX -цепочек с дополнительным изинговским спином

А.В. Артемов, Е.В. Езерская

Харьковский национальный университет им. В.Н. Каразина, пл. Свободы, 4, г. Харьков, 61022, Украина
E-mail: yezerska@karazin.ua

Статья поступила в редакцию 9 июля 2018 г., опубликована онлайн 26 октября 2018 г.

Работа посвящена теоретическому изучению квантовых стационарных состояний и термодинамики двух точно решаемых квантовых моделей: конечной XX -цепочки с «отростком», соединенным ZZ -взаимодействием (изинговским) с одним из узлов цепочки, и двух различных конечных XX -цепочек, соединенных через дополнительный ZZ -спин. Показано, что в спектре могут существовать локализованные вблизи примесного спина примесные уровни, найдены условия их появления. Исследованы полевые и температурные зависимости основных термодинамических характеристик моделей.

Ключевые слова: спин, гамильтониан Гейзенберга, модель Изинга, XX -цепочка, энергетический спектр, термодинамические характеристики, квантовый фазовый переход.

1. Введение

Низкоразмерные системы занимают в физике твердого тела особое место, так как для них часто удается найти точное решение для энергетического спектра. Кроме того, низкотемпературные свойства таких систем в ряде случаев отличаются от аналогичных свойств трехмерных систем. В последние десятилетия открыты соединения [1–3], которые имеют квазиодномерные и квазидвумерные магнитные подрешетки. Открытие высокотемпературной сверхпроводимости в слабо допированных антиферромагнетиках придало дальнейший импульс теоретическим исследованиям низкоразмерных систем. Наличие примесных атомов в реальных магнетиках может существенно изменить их свойства, поэтому теоретическое изучение влияния примесей на спектр и термодинамику спиновых моделей является актуальным. Теоретическое изучение влияния конечных решеточных кластеров (см., например, [4,5]) на различные свойства также актуально в связи с бурным развитием нанотехнологий.

В настоящей работе были рассмотрены две точно решаемые квантовые спиновые модели. Первая модель представляет собой конечную XX -цепочку ($S = 1/2$) с дополнительным «отростком» на одном из узлов цепочки, который связан изинговским взаимодействием с одним из спинов цепочки. Вторая модель — это система из двух XX -цепочек, связанных между собой дополнительным примесным изинговским спином, через который эти цепочки соединены только в двух приме-

жучочных узлах. Дополнительный спин предполагается произвольным.

Выбор XX -модели обусловлен тем, что данная модель относится к числу точно решаемых моделей. Для нее можно найти точный энергетический спектр и исследовать поведение различных термодинамических величин не только для однородной цепочки [6,7], но и для цепочки с примесью [9,10], димеризованной цепочки без примесей [11] и с примесью [12], цепочки со случайными связями [13], с периодическими неоднородностями [14], для цепочки с примесным фрагментом [15]. Энергетический спектр и термодинамические свойства конечной XX -цепочки с изинговской примесью рассмотрены в работе [16]. Добавление примесного «отростка» исследовалось ранее в работе [17] в рамках модели Гейзенберга численным методом группы перенормировки Вайта (DMRG).

2. Стационарные состояния конечных XX цепочек с примесным изинговским звеном

Рассмотрим конечную XX -цепочку с дополнительным изинговским спином произвольной величины, прикрепленным к одному из узлов цепочки (рис. 1).



Рис. 1. (Онлайн в цвете) Конечная XX -цепочка с дополнительным отростком.

Предположим, что наличие отрезка меняет g -фактор в узле n_0 на цепочке, а также обменные взаимодействия

с его ближайшими соседями на XX -цепочке. Гамильтониан такой модели имеет вид

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

Здесь μ_B — магнетон Бора, J — константа обменного взаимодействия в узлах XX -цепочки от 1 до $n_0 - 1$ и от $n_0 + 1$ до N , J' описывает обменное взаимодействие узла n_0 с двумя ближайшими соседями, g, g' и g_0 — g -факторы спинов цепочки всех узлов, кроме узла n_0 , в узле n_0 и в отрезке соответственно, H — постоянное внешнее магнитное поле, направленное вдоль оси z .

Вторая модель, которую мы будем рассматривать, состоит из двух конечных XX -цепочек, соединенных между собой примесным изинговским ZZ -спином-«перемычкой». Количество узлов в каждой из двух XX -цепочек и номер узла на XX -цепочке, к которому присоединен примесный спин — разные для каждой из цепочек (рис. 2). Гамильтониан такой модели имеет следующий вид:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^2 \left[\sum_{n=1; n \neq n_{i0}}^{N_i} g_i \mu_B H S_{in}^z + g'_i \mu_B H S_{in_0}^z + \sum_{n=1; n \neq n_{i0}-1, n_{i0}}^{N_i-1} J_i (S_{in}^x S_{in+1}^x + S_{in}^y S_{in+1}^y) + J'_i (S_{in_{i0}-1}^x S_{in_{i0}}^x + S_{in_{i0}-1}^y S_{in_{i0}}^y + S_{in_{i0}}^x S_{in_{i0}+1}^x + S_{in_{i0}}^y S_{in_{i0}+1}^y) + J_{i0} S_{in_{i0}}^z S_0^z \right] - g_0 \mu_B H S_0^z. \quad (2)$$

Примесный спин влияет не только на узлы $n_{i0}, i = 1, 2$, но и на взаимодействие между ним и двумя соседними узлами каждой из цепочек.

Очевидно, что в обоих случаях выполняются следующие коммутационные соотношения:

$$[\hat{H}, S_0^z] = 0; \quad [\hat{H}, \hat{H}_{XX-chain}] = 0. \quad (3)$$

Это означает, что z -проекция спина дополнительного узла является хорошим квантовым числом. В гамильтонианах (1) и (2) можно заменить оператор S_0^z на его собственные значения и рассматривать как дополнительный параметр $\sigma = -S_0, \dots, S_0$. В результате получим следующие гамильтонианы:

$$\hat{H}(\sigma) = -g\mu_B H \sum_{n=1; n \neq n_0}^N S_n^z - J \sum_{n=1; n \neq n_0-1, n_0}^{N-1} (S_n^x S_{n+1}^x + S_n^y S_{n+1}^y) - J' (S_{n_0-1}^x S_{n_0}^x + S_{n_0-1}^y S_{n_0}^y + S_{n_0}^x S_{n_0+1}^x + S_{n_0}^y S_{n_0+1}^y) - (g'\mu_B H + J_0 \sigma) S_{n_0}^z - g_0 \mu_B H \sigma. \quad (4)$$

$$\hat{H}(\sigma) = -\sum_{i=1}^2 \left[\sum_{n=1; n \neq n_{i0}}^{N_i} g_i \mu_B H S_{in}^z + (g'_i \mu_B H + J_{i0} \sigma) S_{in_0}^z + \sum_{n=1; n \neq n_{i0}-1, n_{i0}}^{N_i-1} J_i (S_{in}^x S_{in+1}^x + S_{in}^y S_{in+1}^y) + J'_i (S_{in_{i0}-1}^x S_{in_{i0}}^x + S_{in_{i0}-1}^y S_{in_{i0}}^y + S_{in_{i0}}^x S_{in_{i0}+1}^x + S_{in_{i0}}^y S_{in_{i0}+1}^y) \right] - g_0 \mu_B H \sigma. \quad (5)$$

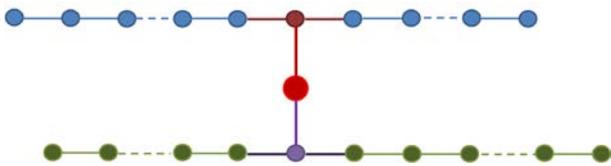


Рис. 2. (Онлайн в цвете) Модель, состоящая из двух XX -цепочек, связанных через дополнительный примесный спин перемычкой.

Выражение (4) — это гамильтониан конечной XX -цепочки с эффективным примесным спином $S = 1/2$ в узле n_0 , а (5) — сумма гамильтонианов двух конечных невзаимодействующих XX -цепочек с эффективным примесным спином $S = 1/2$ в узле $n_{i0}, i = 1, 2$. После преобразования Иордана–Вигнера [6,18] получаем

$$H(\sigma) = E_{\text{ferro}}(\sigma) + g\mu_B H \sum_{n=1; n \neq n_0}^N a_n^+ a_n - \frac{J}{2} \sum_{n=1; n \neq n_0}^N (a_{n+1}^+ a_n + a_n^+ a_{n+1}) - g'\mu_B H a_{n_0}^+ a_{n_0} - J'(a_{n_0}^+ a_{n_0-1} + a_{n_0-1}^+ a_{n_0} + a_{n_0+1}^+ a_{n_0} + a_{n_0}^+ a_{n_0+1}) + J_0 \sigma a_{n_0}^+ a_{n_0}; \quad (6)$$

$$E_{\text{ferro}}(\sigma) = -\frac{1}{2} [(dg_0\mu_B H + J_0)\sigma + g\mu_B H(N-1) + g'\mu_B H],$$

где $d = 2$ в случае цепочки с «отростком» и $d = 1$ — для каждой из двух цепочек с «перемычкой». Формула (6) описывает конечную XX-цепочку с «эффективным» дополнительным спином $s = 1/2$ в узле n_0 . Мы пока опустили несущественный для анализа спектра индекс $i = 1, 2$ для второй модели.

Гамильтониан (6) удобно диагонализировать, решая стационарное уравнение Шредингера для состояний с одним перевернутым спином,

$$\begin{cases} \mathbf{H}|1\rangle = \varepsilon|1\rangle; \\ |1\rangle = \sum_{n=1}^N A_n a_n^\dagger |0\rangle, \end{cases} \quad (7)$$

где A_n — волновая функция в узельном представлении, $|0\rangle$ — вектор вакуумного состояния. Для A_n получаем уравнение в конечных разностях:

$$(\varepsilon_\sigma - h)A_n + \frac{J}{2}(A_{n+1} + A_{n-1}) = 0; \quad n \neq 1, N, n_0, n_0 \pm 1; \quad (8)$$

с граничными условиями:

$$\begin{cases} (\varepsilon - h)A_1 + \frac{J}{2}A_2 = 0; \\ (\varepsilon - h)A_{n_0-1} + \frac{J}{2}A_{n_0-2} + J'A_{n_0} = 0; \\ (\varepsilon - h_0)A_{n_0} + \frac{J'}{2}(A_{n_0-1} + A_{n_0+1}) = 0; \\ (\varepsilon - h)A_{n_0+1} + \frac{J}{2}A_{n_0+2} + \frac{J'}{2}A_{n_0} = 0; \\ (\varepsilon - h)A_N + \frac{J}{2}A_{N-1} = 0. \end{cases} \quad (9)$$

Здесь введены такие обозначения $h = g\mu_B H$, $h_0 = g'\mu_B H + J_0\sigma$.

Как обычно, частное решение (8) ищем в виде $A_n = x_\sigma^n$. В результате получаем выражение для энергии, параметризованное с помощью неизвестной x_σ

$$\varepsilon_\sigma = h - \frac{J}{2} \left(x_\sigma + \frac{1}{x_\sigma} \right). \quad (10)$$

Общее решение (8), (9) ищем в виде

$$A_n = A_n(\sigma, x_\sigma) = \begin{cases} C_1 x_\sigma^n + C_2 x_\sigma^{-n}; & 1 \leq n \leq n_0 - 1; \\ A_{n_0}; & n = n_0; \\ C_3 x_\sigma^n + C_4 x_\sigma^{-n}; & n_0 + 1 \leq n \leq N. \end{cases} \quad (11)$$

После подстановки (10), (11) в (9) находим дисперсионное уравнение, которое вместе с (10) определяет все возможные значения x_σ , а следовательно, и энергии состояний с одним перевернутым спином

$$\begin{aligned} & [x_\sigma(\beta - \gamma) - x_\sigma^2 - 1] \left[(1 - x_\sigma^{2n_0}) (1 - x_\sigma^{2(N-n_0+1)}) \right] + \\ & + \alpha^2 x_\sigma^2 \left[(1 - x_\sigma^{2(n_0-1)}) (1 - x_\sigma^{2(N-n_0+1)}) \right] + \\ & + (1 - x_\sigma^{2n_0}) (1 - x_\sigma^{2(N-n_0)}) \Big] = 0, \quad (12) \\ & \alpha = \frac{J'}{J}, \quad \beta = \frac{2(g-g')\mu_B H}{J}, \quad \gamma = \frac{2J_0\sigma}{J}. \end{aligned}$$

После исключения тривиальных решений $x_\sigma = \pm 1$ имеем

$$\begin{aligned} & [x_\sigma(\beta - \gamma) - x_\sigma^2 - 1] \sum_{l=0}^{n_0-1} x_\sigma^{2l} \sum_{l=0}^{N-n_0} x_\sigma^{2l} + \\ & + \alpha^2 x_\sigma^2 \left[\sum_{l=0}^{n_0-2} x_\sigma^{2l} \sum_{l=0}^{N-n_0} x_\sigma^{2l} + \sum_{l=0}^{n_0-1} x_\sigma^{2l} \sum_{l=0}^{N-n_0-1} x_\sigma^{2l} \right] = 0. \quad (13) \end{aligned}$$

Очевидно, что возможны два типа решений:

1) комплексные значения $x_\sigma = \exp(ik)$, которые отвечают состояниям квазинепрерывного спектра,

$$\varepsilon_{k_\sigma} = g\mu_B H - J \cos k_\sigma, \quad (14)$$

2) вещественные значения x_σ , $|x_\sigma| < 1$, которые отвечают локальным примесным уровням. Отщеплению локального уровня от нижней или верхней границ спектра (14) отвечают $x_\sigma = +1$ и $x_\sigma = -1$ соответственно. Подставляя эти значения в (13), получим

$$\begin{aligned} & \alpha^2 = \kappa [2 \mp (\beta - \gamma)], \\ & \kappa = \frac{n_0(N+1-n_0)}{n_0(N-n_0) + (n_0-1)(N+1-n_0)}. \end{aligned} \quad (15)$$

Знаки неравенств, которые определяют условия существования локальных примесных уровней, определяем, переходя к пределу $N \rightarrow \infty$ (см. [10]),

$$\alpha^2 > \kappa [2 \mp (\beta - \gamma)]. \quad (16)$$

Знак « \rightarrow » в (16) отвечает отщеплению уровня от нижней, а « $+$ » — от верхней границы зоны (14). На рис. 3 показана зависимость параметра κ от номера

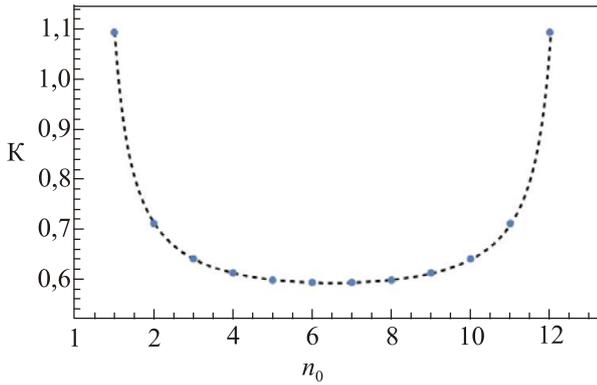


Рис. 3. Зависимость параметра K от номера узла n_0 XX -цепочки, к которому прикреплен «отросток»

узла n_0 XX -цепочки, к которому прикреплен «отросток». Для появления локальных уровней на крайних узлах цепочки по сравнению с серединой требуется значительно большее взаимодействие дополнительного спина с основной цепочкой. Это согласуется с замечанием, сделанным в работе [10]. Дисперсионное уравнение (13) является алгебраическим уравнением степени $2N$ и легко решается численно.

Зависимость от внешнего магнитного поля в формулах (13) и (16) присутствует только при $\beta \neq 0$, что отвечает различным g -факторам для примесного спина и остальных спинов на цепочке.

Диагонализированный гамильтониан (6) принимает вид

$$\hat{H}(\sigma) = E_{\text{ferro}}(\sigma) + \sum_{\lambda} \varepsilon_{\lambda\sigma} b_{\lambda\sigma}^{\dagger} b_{\lambda\sigma}. \quad (17)$$

Старые и новые операторы связаны фурье-преобразованием:

$$b_{\lambda\sigma} = \sum_n A_n^*(\lambda, \sigma) a_{n\sigma}; \quad a_{n\sigma} = \sum_{\lambda} A_n(\lambda, \sigma) b_{\lambda\sigma}, \quad (18)$$

где $A_n(\lambda, \sigma)$ — это нормированные на единицу собственные функции в узельном представлении. Заметим, что мы нашли не спектр возбужденных состояний, а все стационарные состояния с одним перевернутым спином, энергия которых может быть в слабых полях как положительной, так и отрицательной. Отрицательным энергиям, как известно, отвечает рождение «дырок». Заменой операторов уничтожения на операторы рождения частиц можно ввести настоящие возбуждения. Нормированные волновые функции (11) приведены в приложении А.

3. Низкотемпературные термодинамические свойства

Статистические суммы для рассматриваемых моделей вычисляются по следующим формулам:

$$Z = \sum_{\sigma=-S_0}^{S_0} Z(\sigma), \quad (19)$$

$$Z = \sum_{\sigma=-S_0}^{S_0} Z_1(\sigma)Z_2(\sigma) \quad (20)$$

для цепочки с «отростком» и для двух цепочек с дополнительной связью соответственно, где $Z(\sigma)$, $Z_1(\sigma)$, $Z_2(\sigma)$ — это статистическая сумма конечной XX -цепочки при фиксированном значении параметра σ , которая вычисляется по стандартной формуле:

$$Z_i(\sigma) = \exp \frac{E_{i,\text{ferro}}(\sigma)}{T} \text{Tr} \left[\exp \left(-\frac{1}{T} \sum_{\lambda_i} \varepsilon_{\lambda_i\sigma} b_{\lambda_i\sigma}^{\dagger} b_{\lambda_i\sigma} \right) \right]; \quad i = 1, 2; \quad (21)$$

Для расчета среднего значения z -проекции спина для узлов основной цепочки также следует выполнить двойное усреднение:

$$\begin{aligned} \langle S_n^z \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S_0}^{S_0} Z(\sigma) \langle S_n^z(\sigma) \rangle = \\ &= \frac{1}{2} - \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S_0}^{S_0} Z(\sigma) \sum_{\lambda} |A_{\lambda}(\sigma)|^2 f(\varepsilon_{\lambda}(\sigma)), \end{aligned} \quad (22)$$

где $f(\varepsilon) = \frac{1}{e^{\varepsilon/T} + 1}$ — распределение Ферми–Дирака.

Для второй модели формула имеет вид

$$\begin{aligned} \langle S_{in}^z \rangle &= \frac{1}{2} - \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} Z_1(\sigma)Z_2(\sigma) \sum_{\lambda} |A_{n\lambda}^{(i)}(\sigma)|^2 f(\varepsilon_{i\lambda}(\sigma)); \\ & \quad i = 1, 2. \end{aligned} \quad (23)$$

Аналогично можно вычислить парные продольные корреляторы. Например, коррелятор для дополнительного спина со спином на цепочке вычисляется по формуле

$$\begin{aligned} \langle S_0^z S_{in}^z \rangle &= \frac{1}{2} \langle S_0^z \rangle - \\ & - \frac{1}{Z} \sum_{\sigma} \sigma_0 Z_1(\sigma)Z_2(\sigma) \sum_{\lambda} |A_{\lambda n}^{(i)}(\sigma)|^2 f(\varepsilon_{i\lambda}(\sigma)). \end{aligned} \quad (24)$$

Для цепочки с «отростком» в (23) и (24) не будет индекса i , а $Z_1(\sigma)Z_2(\sigma)$ заменяется на $Z(\sigma)$.

$$\begin{aligned} \langle S_m^z S_n^z \rangle &= \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S_0}^{S_0} \left[\langle S_m^z(\sigma) \rangle \langle S_n^z(\sigma) \rangle - \right. \\ & \left. - \left| \sum_{\lambda} A_{\lambda m}^*(\sigma) A_{\lambda n}(\sigma) f(\varepsilon_{\lambda}(\sigma)) \right|^2 \right] Z(\sigma). \end{aligned} \quad (25)$$

Формула (25) справедлива и для двух цепочек с перемычкой для узлов одной и той же цепочки при замене $Z(\sigma) \rightarrow Z_1(\sigma)Z_2(\sigma)$. Для разных цепочек формула упрощается

$$\langle S_{1m}^z S_{2n}^z \rangle = \frac{1}{Z} \sum_{\sigma=-S_0}^{S_0} \langle S_{1m}^z(\sigma) \rangle \langle S_{2n}^z(\sigma) \rangle Z_1(\sigma) Z_2(\sigma). \quad (26)$$

При $\beta \neq 0$ намагниченность не является квантовым числом. Ее удобно рассчитывать по формуле

$$m = \frac{g_0 \langle S_0 \rangle + \left[\sum_{i=1}^2 g_i \langle S_{i,\text{chain}}^z \rangle + (g'_i - g_i) \langle S_{in_0}^z \rangle \right]}{(N+1)}. \quad (27)$$

Здесь N — это либо число узлов в XX-цепочке для первой модели, либо общее число спинов $N_1 + N_2$ в двух цепочках для второй модели.

На рис. 4(а), (б) показаны полевые зависимости намагниченности и среднего значения полного спина для XX-цепочки с «отростком» в случае сильного антиферромагнитного (АФ) взаимодействия отростка с цепочкой. Скачок в сильном поле мы связываем с переворотом спина отростка.

Отметим, что для внутренних узлов $n_0 \neq 1, N$ для выбранных значений параметров зависимости практически одинаковы. Переворот спина отростка, прикрепленного к одному из концов XX-цепочки, происходит при меньших значениях магнитного поля. В случае

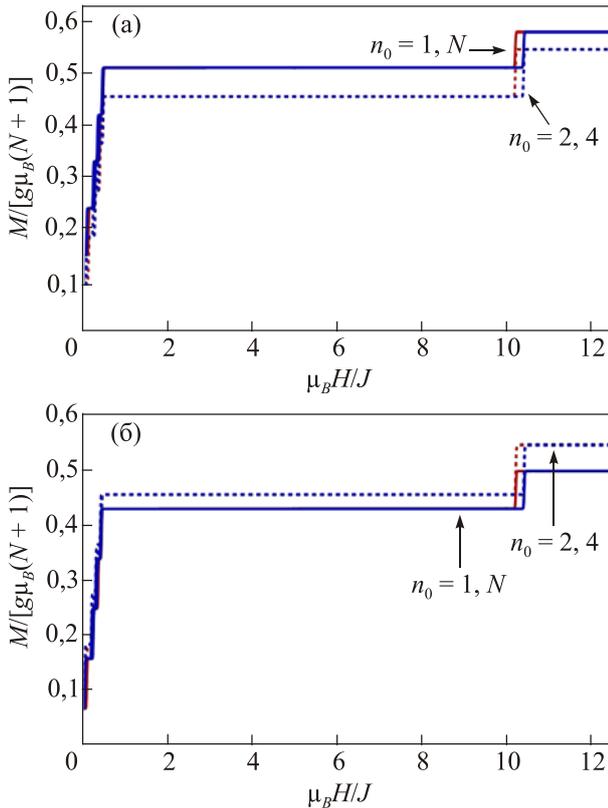


Рис. 4. Полевые зависимости безразмерного среднего магнитного момента в расчете на один спин $M/[g\mu_B(N+1)]$ (сплошные линии) и среднего полного спина $\langle S^z \rangle / (N+1)$ (штриховые линии) в расчете на один спин для XX-цепочки с отростком при $S_0 = 1$; $T = 0,01$ К; $N = 10$; $J = 1$ К; $J_1 = 5$ К; $J_0 = -15$ К; $g = 2$; $g_1 = 1,5$; $g_0 = 3$ (а); $g_0 = 1,2$ (б).

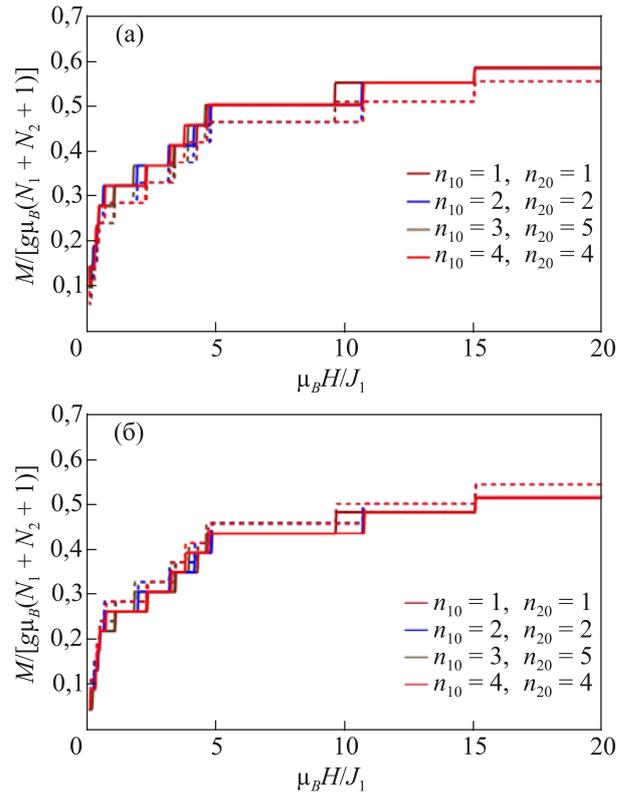


Рис. 5. (Онлайн в цвете) Полевые зависимости безразмерного среднего магнитного момента в расчете на один спин $M/[g\mu_B(N+1)]$ (сплошные линии) и среднего полного спина $\langle S^z \rangle / (N+1)$ (штриховые линии) в расчете на один спин для двух XX-цепочек с перемычкой при $S_0 = 3/2$; $T = 0,01$ К; $N_1 = 10$; $g_1 = 2$; $g'_1 = 1,5$; $J_1 = 1$; $J'_1 = 1,5$; $N_2 = 12$; $J_2 = 10$; $J'_2 = 15$; $g_2 = 2$; $g'_2 = 2,2$; $J_{10} = -15$; $J_{10} = -12$; $g_0 = 3$ (а); $g_0 = 1,2$ (б).

$g_0 > g'$ (рис. 4(а)) относительная намагниченность $M/[g\mu_B(N+1)]$ меньше, чем среднее значение спина $\langle S^z \rangle / (N+1)$, а при $g_0 < g'$ — наоборот (рис. 4(б)).

На рис. 5 (а), (б) показаны полевые зависимости $M/[g\mu_B(N+1)]$ и $\langle S^z \rangle / (N+1)$ для двух цепочек с дополнительным звеном в случае сильной АФ связи между цепочками для различных расположений дополнительного звена. Обменные взаимодействия вдоль цепочек выбраны существенно разными, чтобы в слабых полях можно различить вклады каждой из цепочек и вклад от дополнительного изинговского спина.

На рис. 6, 7 изображены полевые зависимости намагниченности и теплоемкости для двух XX-цепочек с перемычкой для различных значений дополнительного спина. С ростом величины спина «отростка» насыщение наблюдается при больших значениях внешнего поля. Зависимость теплоемкости от внешнего поля при низких температурах имеет сложный характер. Экстремумы теплоемкости в сильных полях мы связываем с спин-флоп переходом дополнительного спина.

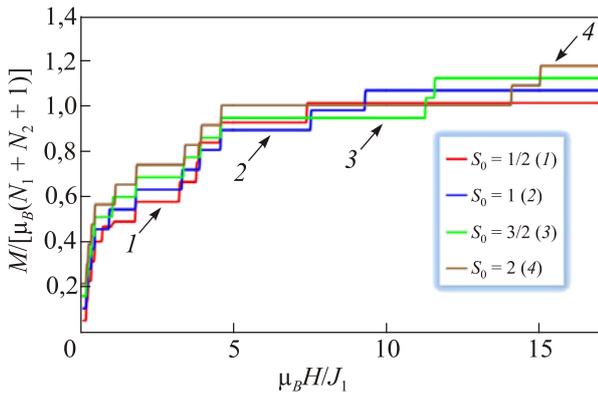


Рис. 6. (Онлайн в цвете) Полевая зависимость безразмерной намагниченности в расчете на один спин для различных значений S_0 для двух XX-цепочек при $T = 0,01$ К для таких значений параметров: $N_1 = 10$; $N_2 = 12$; $n_{10} = 3$; $n_{20} = 5$; $J_1 = J'_1 = 1$ К; $J_2 = 10$ К; $J'_2 = 15$ К; $J_{10} = -15$ К; $J_{20} = -12$ К; $g_{1,2} = g'_{1,2} = 2$; $g_0 = 2,5$.

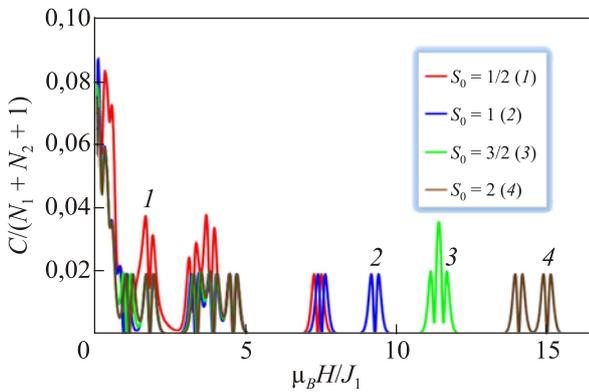


Рис. 7. (Онлайн в цвете) Полевая зависимость теплоемкости в расчете на один спин для различных значений S_0 для двух XX-цепочек с перемычкой при $T = 0,1$ К. Все остальные значения параметров такие же, как на рис. 6.

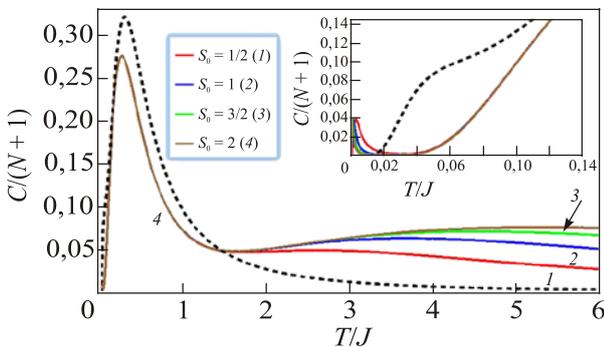


Рис. 8. (Онлайн в цвете) Зависимость теплоемкости на один спин от температуры XX-цепочки с отростком при $H = 0$ для $N = 10$; $n_0 = 3$; $J = J' = 1$ К; $J_0 = -15$ К; $g = g' = 2$; $g_0 = 2,5$; штриховая линия — теплоемкость однородной конечной XX-цепочки.

Характерной особенностью температурной зависимости теплоемкости одномерных магнетиков является наличие широкого максимума теплоемкости при температурах порядка обменной константы. Наличие примесей и конечность системы может дать дополнительные максимумы. На рис. 8 показана зависимость от температуры в нулевом поле теплоемкости для конечной XX-цепочки с «отростком». Первый максимум при очень низкой температуре мы связываем с влиянием

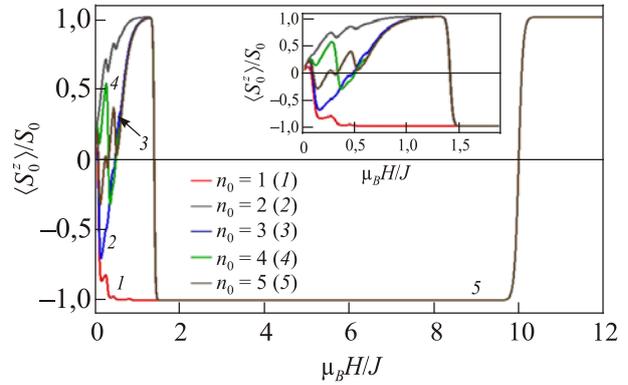


Рис. 9. (Онлайн в цвете) Полевая зависимость $\langle S_0^z \rangle / S_0$ для $S_0 = 1/2$; $N = 10$; $J = 1$; $J' = 5$; $J_0 = -8$; $g = 1,5$; $g' = 2$; $g_0 = 0,4$ при $T = 0,02$ К.

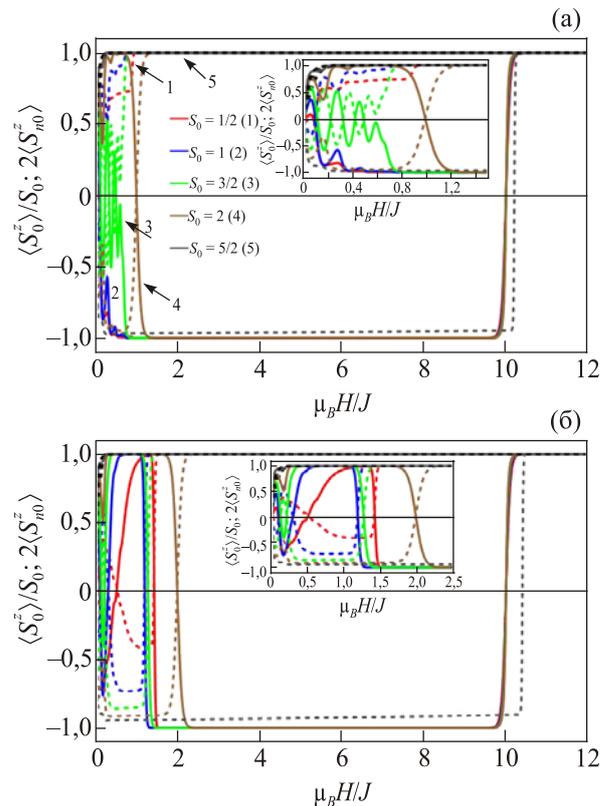


Рис. 10. (Онлайн в цвете) Полевая зависимость среднего спина отростка и ближайшего к нему спина на цепочке при разных значениях S_0 для двух различных расположений отростка при $N = 10$, $J = 1$ К, $J' = 5$ К, $J_0 = -8$ К, $g = 1,5$, $g' = 2$, $g_0 = 0,4$ при $T = 0,02$ К. $n_0 = 1$ (а); $n_0 = 3$ (б). Сплошные линии — $\langle S_0^z \rangle / S_0$, штриховая линия — $2\langle S_{n_0}^z \rangle$.

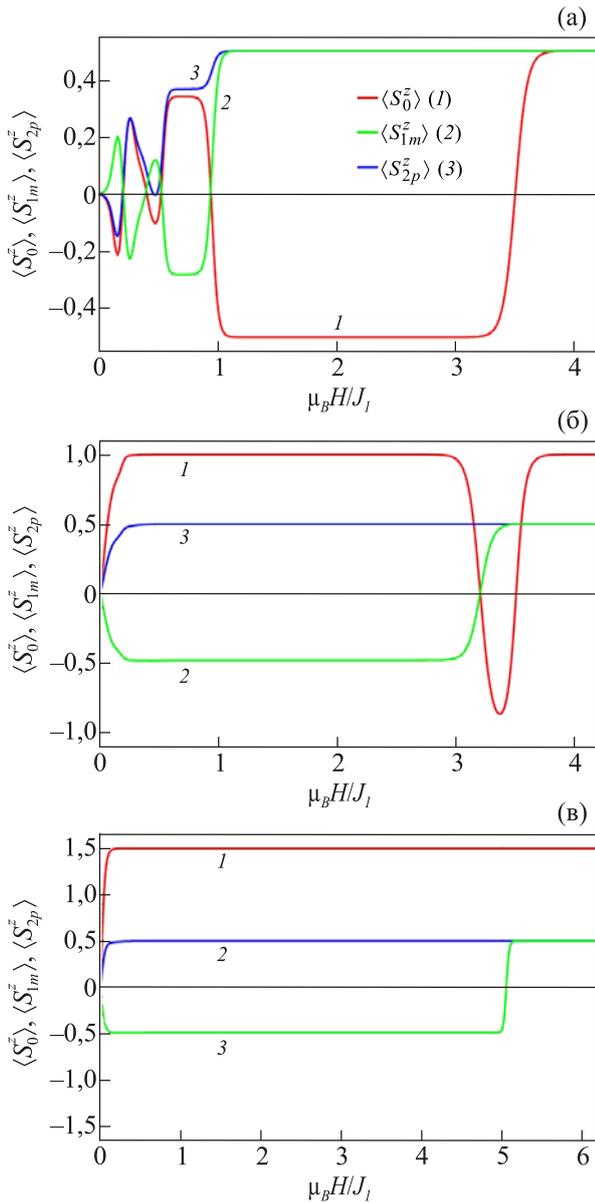


Рис. 11. (Онлайн в цвете) Полевая зависимость среднего значения дополнительного спина и ближайших к нему спинов цепочек при сильном антиферромагнитном взаимодействии дополнительного спина при $T = 0,05$ К, $N_1 = 7$, $n_{10} = m = 3$, $N_2 = 9$, $n_{20} = p = 5$, $J_2 = J'_2 = 2$ К, $I_1 = 3$ К, $I_2 = -10$ К, $g_1 = g'_1 = 3$, $g_2 = g'_2 = 2$, $g_0 = 1$, $J_1 = J'_1 = 1$ К для разных значений спина $S_0 = 1/2$ (а); $S_0 = 1$ (б); $S_0 = 3/2$ (в).

конечности размеров системы, второй максимум — с XX-цепочкой и третий, широкий плавный максимум, который сдвигается в область больших температур для больших значений спина отростка, можно объяснить влиянием этого «отростка».

Более подробную информацию о процессах перемагничивания и влиянии примесей на низкотемпературные свойства моделей можно получить при анализе полевых и температурных зависимостей локальных термодина-

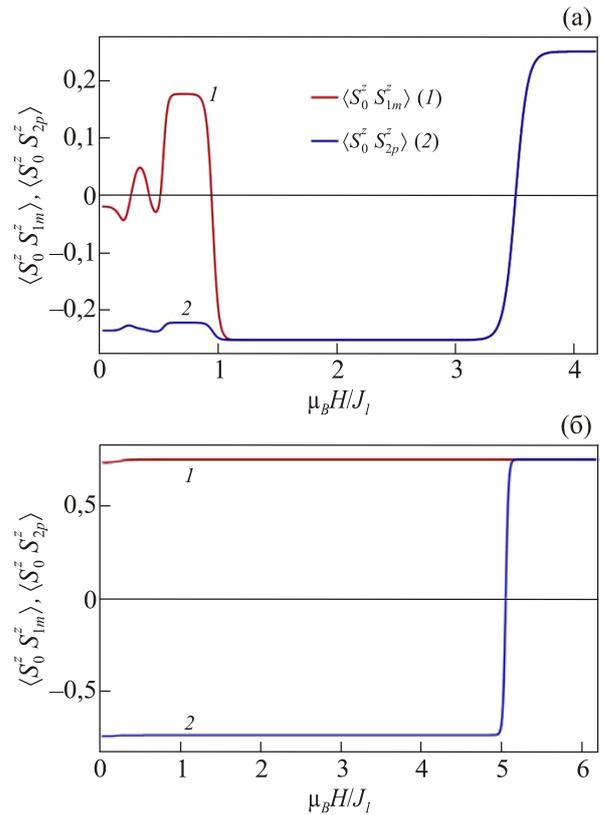


Рис. 12. (Онлайн в цвете) Полевая зависимость продольного коррелятора при различных значениях примесного спина. Значения параметров те же, что и на рис. 11.

мических характеристик, в частности средних значений спина в узлах и продольных корреляторов.

На рис. 9 приведены полевые зависимости $\langle S_0 \rangle / S_0$ XX-цепочки с «отростком» для разных расположений отростка при $S_0 = 1/2$ для сильного АФ взаимодействия отростка с цепочкой. Как видно на рисунке, в слабых полях для $g_0 < g, g'$ ориентация спина дополнительного звена («отростка») может несколько раз меняться.

На рис. 10 видно, что в слабых полях при антиферромагнитном взаимодействии «отростка» с цепочкой поведение среднего значения z -проекции спинов неустойчивое. Как и следовало ожидать, спины в ближайших соседних узлах в слабых полях антипараллельны. Такая же тенденция наблюдается и для двух цепочек с дополнительным звеном (см. рис. 11).

На рис. 12 видно, что при выбранных значениях параметров продольный коррелятор $\langle S_{1n_0}^z S_0^z \rangle$ принимает в слабых полях отрицательные значения, т.е. спины ориентированы в противоположных направлениях вплоть до критического значения поля, при котором коррелятор достигает максимального значения. Количество перемен знака $\langle S_{2n_{20}}^z S_0^z \rangle$ уменьшается с ростом величины дополнительного спина.

4. Заключение

Для двух точно решаемых спиновых моделей — конечной XX-цепочки с «отростком», связанной с основной цепочкой изинговским взаимодействием, и двух конечных XX-цепочек, которые связаны между собой одним дополнительным ZZ-спином — были получены точные дисперсионные уравнения. Найдены и проанализированы аналитические неравенства для критических значений параметров моделей, при которых появляются локальные примесные энергетические уровни. Проведено численное моделирование полевых и температурных зависимостей основных термодинамических характеристик при различных значениях параметров моделей.

В частности, было показано, что полевая зависимость теплоемкости имеет сложный характер с многочисленными минимумами и максимумами, а полевая зависимость намагниченности при очень низких температурах может иметь конечные скачки, связанные с примесными уровнями.

При низких температурах среднее значение примесного спина в случае антиферромагнитного взаимодействия ZZ с основной цепочкой XX имеет осциллирующее поведение в слабом магнитном поле и скачок в критическом поле. Мы связываем этот скачок с спин-

флоп переходом дополнительного спина вдоль направления магнитного поля.

Е.В. Езерская выражает благодарность международному гранту VolkswagenStiftung, Germany (grant 151110) за финансовую поддержку.

Приложение А Нормированные волновые функции

Для изучения локальных термодинамических характеристик нужно знать нормированные волновые функции обеих моделей.

Условиями ортогональности и нормировки волновых функций для конечной цепочки являются следующие выражения:

$$\sum_{n=1}^N A_n^*(\lambda)A_n(\lambda') = \delta_{\lambda,\lambda'}; \quad \sum_{\lambda} A_n^*(\lambda)A_n(\lambda) = \delta_{n,n'}. \quad (A1)$$

Здесь параметр λ — это квантовое число, которое является либо квазиимпульсом, k для состояний квазинепрерывного спектра, либо нумерует все локализованные примесные уровни.

$$|A_{n_0}(\lambda)|^2 + \sum_{n=1}^{n_0-1} |A_n(\lambda)|^2 + \sum_{n=n_0+1}^N |A_n(\lambda)|^2 = 1;$$

$$|A_{n_0}(\lambda)|^2 = \left[1 + \alpha^2 \left(\frac{\sum_{n=1}^{n_0-1} |x_{\lambda}^n - x_{\lambda}^{-n}|^2}{|x_{\lambda}^{n_0} - x_{\lambda}^{-n_0}|^2} + \frac{\sum_{n=1}^{N-n_0} |x_{\lambda}^n - x_{\lambda}^{-n}|^2}{|x_{\lambda}^{N+1-n_0} - x_{\lambda}^{n_0-N-1}|^2} \right) \right]^{-1}. \quad (A2)$$

После некоторых преобразований для состояний квазинепрерывного спектра получим следующую волновую функцию, которая является стоячей волной

$$A_n(k) = \begin{cases} \alpha A_{n_0}(k) \frac{\sin kn}{\sin kn_0}, & 1 \leq n \leq n_0 - 1; \\ A_{n_0}(k), & n = n_0; \\ \alpha A_{n_0}(k) \frac{\sin k(N+1-n)}{\sin k(N+1-n_0)}, & n_0 + 1 \leq n \leq N. \end{cases} \quad (A3)$$

$$A_{n_0}(k) = \sqrt{2} \left[2 + \alpha^2 \left(\frac{n_0}{\sin^2 kn_0} + \frac{N+1-n_0}{\sin^2 k(N+1-n_0)} \right) - \alpha^2 \left(\frac{\cos k(n_0-1)}{\sin kn_0} + \frac{\cos k(N-n_0)}{\sin k(N+1-n_0)} \right) \right]^{-1/2}.$$

На дефектном узле происходит дополнительное рассеяние.

Для локализованных состояний волновые функции имеют следующий вид:

$$A_n = \begin{cases} \alpha A_{n_0} \frac{x^n - x^{-n}}{x^{n_0} - x^{-n_0}}, & 1 \leq n \leq n_0 - 1; \\ A_{n_0}(k), & n = n_0; \\ \alpha A_{n_0} \frac{x^{N+1-n} - x^{-(N+1-n)}}{x^{N+1-n_0} - x^{-n_0}}, & n_0 + 1 \leq n \leq N; \end{cases}$$

$$A_{n_0} = \left\{ \frac{\alpha^2 x^2}{1-x^2} \left[\frac{(1-x^{2(n_0-1)})(1+x^{2n_0})}{(1-x^{2n_0})^2} \frac{(1-x^{2(N-n_0)})(1+x^{2(N+1-n_0)})}{(1-x^{2(N+1-n_0)})^2} \right] - 2\alpha^2 \left[\frac{(n_0-1)x^{2n_0}}{(1-x^{2n_0})^2} + \frac{(N-n_0)x^{2(N+1-n_0)}}{(1-x^{2(N+1-n_0)})^2} \right] + 1 \right\}^{-1/2}. \quad (A4)$$

В разд. 3 мы использовали (A3) и (A4) при расчетах локальных термодинамических характеристик.

1. L.J. de Jongh and A.R. Miedema, *Adv. Phys.* **23**, 1 (1974).
2. E. Stryjewski and N. Giordano, *Adv. Phys.* **26**, 533 (1977).
3. H.-J. Mikeska and A.K. Kolezhuk, *One-dimensional Magnetism, in: Quantum Magnetism, U. Schollwöck, J. Richter, D.J.J. Farnell, and R.F. Bishop (eds.), Lecture Notes in Physics, Springer-Verlag, Berlin, Heidelberg (2004), vol. 1, 645.*
4. A.A. Zvyagin, *Finite Size Effects in Correlated Electron Models: Exact Results*, Imperial College Press, London (2005).
5. A.A. Zvyagin, *Quantum Theory of One-Dimensional Spin Systems*, Cambridge Scientific Publishers, Cambridge (2010).
6. E. Lieb, J. Schults, and D. Mattis, *Ann. Phys.* **16**, 407, (1961).
7. С.А. Пикин, В.М. Цукерник, *ЖЭТФ* **50**, 1377 (1966).
8. В.М. Конторович, В.М. Цукерник, *ЖЭТФ* **52**, 1466 (1967).
9. В.З. Клейнер, В.М. Цукерник, *ФММ* **39**, 947 (1975).
10. В.З. Клейнер, В.М. Цукерник, *ФНТ* **6**, 332 (1980) [*Low Temp. Phys.* **6**, 158 (1980)].
11. В.М. Конторович, В.М. Цукерник, *ЖЭТФ* **53**, 1167 (1967).
12. A.A. Zvyagin, *Phys. Rev. B* **97**, 144412 (2018)
13. O. Derzhko and J. Richter, *Phys. Rev. B* **55**, 14298 (1997).
14. O. Derzhko, J. Richter, and O. Zaburanyi, *JMMM* **222**, 207 (2000).
15. E.V. Ezerskaya, A.A. Човпан, *ФНТ* **32**, 1213 (2006) [*Low Temp. Phys.* **32**, 921 (2006)].
16. E.V. Ezerskaya, *Acta Phys. Polon. Ser. A* **131**, 928 (2017).
17. S. Rommer and S. Eggert, *Phys. Rev. B* **59**, 6301 (1999).
18. P. Jordan and E. Wigner, *Z. Phys.* **47**, 631 (1928).

Низькотемпературні властивості скінченних XX-ланцюжків з додатковим ізинговським спіном

А.В. Артьомов, О.В. Єзерська

Роботу присвячено теоретичному вивченню квантових стаціонарних станів та термодинаміки двох точно розв'язуваних квантових моделей: кінцевого XX-ланцюжка з «відростком», зв'язаним ZZ-взаємодією (ізинговською) з одним з вузлів ланцюжка, та двох різних скінченних XX-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.

Ключові слова: спін, гамільтоніан Гейзенберга, модель Ізінга, XX-ланцюжок, енергетичний спектр, термодинамічні характеристики, квантовий фазовий перехід.

Low-temperature properties of finite XX-chains with an additional Ising spin

A.V. Artemov and E.V. Ezerskaya

This work is devoted to the theoretical study of quantum stationary states and thermodynamics of two exactly solvable quantum models: a finite linear XX-chain with an additional ZZ-bond (Ising) on one of the intermediate nodes and two distinct finite XX-chains, connected through an additional ZZ-spin on one of the intermediate nodes each of the chains. It is shown that localized levels near the impurity spin may exist in the spectrum, and conditions for their appearance are found. The field and temperature dependences of the main thermodynamic characteristics of models are studied.

Keywords: spin, Heisenberg Hamiltonian, Ising model, XX-chain, energy spectrum, thermodynamic characteristics, quantum phase transition.