

НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР  
ім. Б. І. ВЕРКІНА

КРИВЧИКОВ Олексій Олександрович

УДК 537.621.4; 537.624.9

ОСОБЛИВОСТІ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ  
НИЗЬКОВИМІРНИХ ФРУСТРОВАНИХ СИСТЕМ ТА ЧИСЕЛЬНЕ  
МОДЕЛЮВАННЯ ЇХ ОСНОВНИХ СТАНІВ

01.04.02 – теоретична фізика

**Автореферат**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2016

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Славін Віктор Валерійович,**  
Фізико-технічний інститут низьких температур  
ім. Б. І. Веркіна НАН України,  
завідувач лабораторії чисельних методів  
теоретичної фізики.

**Офіційні опоненти:**

доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Усатенко Олег Вікторович,**  
Інститут радіофізики та електроніки  
ім. О. Я. Усикова НАН України,  
провідний науковий співробітник  
відділу теоретичної фізики.

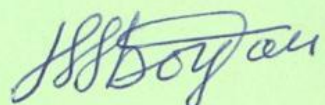
доктор фізико-математичних наук, професор  
**Пашкевич Юрій Георгійович,**  
Донецький фізико-технічний інститут  
ім. О. О. Галкіна НАН України (м. Київ),  
завідувач відділу теорії динамічних  
властивостей складних систем.

Захист відбудеться « 14 » червня 2016 року о 15<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.175.02 при Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

Автореферат розісланий « 13 » травня 2016 року.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради  
доктор фізико-математичних наук

 Богдан М. М.

**НАЦІОНАЛЬНА АКАДЕМІЯ НАУК УКРАЇНИ  
ФІЗИКО-ТЕХНІЧНИЙ ІНСТИТУТ НИЗЬКИХ ТЕМПЕРАТУР  
ім. Б. І. ВЕРКІНА**

**КРИВЧИКОВ Олексій Олександрович**

УДК 537.621.4; 537.624.9

**ОСОБЛИВОСТІ ТЕРМОДИНАМІЧНИХ ВЛАСТИВОСТЕЙ  
НИЗЬКОВИМІРНИХ ФРУСТРОВАНИХ СИСТЕМ ТА ЧИСЕЛЬНЕ  
МОДЕЛЮВАННЯ ЇХ ОСНОВНИХ СТАНІВ**

01.04.02 – теоретична фізика

**Автореферат**  
дисертації на здобуття наукового ступеня  
кандидата фізико-математичних наук

Харків – 2016

Дисертацією є рукопис.

Робота виконана в Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України

**Науковий керівник:** доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Славін Віктор Валерійович,**  
Фізико-технічний інститут низьких температур  
ім. Б. І. Веркіна НАН України,  
завідувач лабораторії чисельних методів  
теоретичної фізики.

**Офіційні опоненти:** доктор фізико-математичних наук,  
старший науковий співробітник  
**Усатенко Олег Вікторович,**  
Інститут радіофізики та електроніки  
ім. О. Я. Усикова НАН України,  
провідний науковий співробітник  
відділу теоретичної фізики.

доктор фізико-математичних наук, професор  
**Пашкевич Юрій Георгійович,**  
Донецький фізико-технічний інститут  
ім. О. О. Галкіна НАН України (м. Київ),  
завідувач відділу теорії динамічних  
властивостей складних систем.

Захист відбудеться « 14 » червня 2016 року о 15<sup>00</sup> годині на засіданні спеціалізованої вченої ради Д 64.175.02 при Фізико-технічному інституті низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

З дисертацією можна ознайомитись в бібліотеці Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України за адресою: 61103, м. Харків, проспект Науки, 47.

Автореферат розісланий «      » травня 2016 року.

Вчений секретар  
спеціалізованої вченої ради  
доктор фізико-математичних наук

Богдан М. М.

## ЗАГАЛЬНА ХАРАКТЕРИСТИКА РОБОТИ

**Актуальність теми.** Останнім часом у теоретичній фізиці магнітних явищ і фізиці сильно корельованих електронних систем спостерігається значний прогрес. Це пов'язано з розвитком чисельних методів дослідження таких систем та зростанням потужностей сучасної обчислювальної техніки. Стало можливим моделювання класичних рівноважних та квантових станів систем зі складною структурою, великим розміром та великою кількістю частинок. Зокрема, виникли нові можливості для визначення основного стану таких систем, як фрустровані антиферромагнетики, важка ферміонна рідина, спінове скло і спіновий лід. Сильно скорельовані системи з геометричною фрустрацією на даний час викликають значний теоретичний і експериментальний інтерес завдяки сукупності нових ефектів, які в них спостерігаються.

Двовимірні електронні системи над поверхнею рідкого гелію є цікавими об'єктами завдяки низці незвичайних властивостей. Одним з найбільш відомих об'єктів даного типу є вігнеровський кристал. Як відомо, такий стан утворюється, коли потенціальна енергія набагато більше, ніж кінетична. Важливою проблемою залишалось дослідження стійкості вігнеровського кристалу. Як показано в роботі, процес його руйнації може бути описаний в рамках багаточастинкової фрустрованої моделі, де переходи між основним та збудженим станом електронів моделюються переворотом ефективних спінів.

Низьковимірні та шаруваті вузькозонні напівпровідники, де носії заряду локалізовані на вузлах решітки-матриці, викликають значний інтерес завдяки низки незвичайних транспортних і термодинамічних властивостей. Такі системи на ідеальній решітці-матриці мають назву «узагальнений вігнеровський кристал». В реальних фізичних системах завжди присутні дефекти та домішки, наявність яких може призводити до фрустрацій основного стану та руйнування дальнього порядку.

Решітка Шастри-Сазерленда є одним із прикладів системи з геометричною фрустрацією з аномальною поведінкою намагніченості в присутності магнітного поля. Модель Шастри-Сазерленда і її експериментальна реалізація привернула увагу після виявлення аномальної поведінки рідкісноземельних тетраборидів в магнітному полі. Важливим є виявлення спільних властивостей таких фрустрованих моделей, як система електронів на непорядкованій решітці-матриці, система електронів на поверхні рідкого гелію, та решітка типу Шастри-Сазерленда, та встановлення їх унікальних особливостей. Зокрема, детальне теоретичне дослідження термодинаміки решітки Шастри-Сазерленда може стимулювати подальші теоретичні та експериментальні дослідження складних магнітних фрустрованих систем.

Таким чином, важливість вирішення низки питань в області теоретичної фізики, що стосуються фрустрацій в низьковимірних магнітних системах та у двовимірних електронних системах – вігнеровських кристалах, зумовлює **актуальність** обраної теми дисертаційної роботи як з позиції фундаментальної науки, так і з позиції практичного матеріалознавства.

### **Зв'язок роботи з науковими програмами, планами, темами.**

Дисертаційна робота виконана у відділі теоретичної фізики Фізико-технічного інституту низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України в межах тематичного плану ФТІНТ ім. Б. І. Веркіна НАН України за відомчими тематиками: «Теорія колективних явищ в низькорозмірних конденсованих середовищах і наноструктурах» (номер державної реєстрації 0107U000946, термін виконання 2007–2011 рр.), «Теоретичні дослідження нелінійних і квантових явищ в наноструктурах і нових матеріалах» (номер державної реєстрації 0112U002642, термін виконання 2012–2016 рр.).

**Мета і завдання дослідження.** *Мета* дисертаційної роботи полягає у теоретичному описі основного стану та виявленні особливостей термодинамічних властивостей двовимірної фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда та неупорядкованих одно- і двовимірних систем електронів.

Для досягнення поставленої в роботі мети необхідно було вирішити такі **завдання**:

- в рамках класичної моделі Гейзенберга дослідити намагніченість фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда зі взаємодією найближчих сусідів;
- в рамках квантової XXZ-моделі дослідити намагніченість фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда з ізотропною обмінною взаємодією між спінами;
- дослідити, яким чином відбувається руйнування трансляційної симетрії електронного газу на неупорядкованій решітці-матриці з потенціалом відштовхування.

**Об'єктом дослідження** в даній роботі є динаміка низькорозмірної фрустрованої решітки у випадку фрустрацій геометричного або безладного типу.

**Предметом дослідження** є вплив легковісної обмінної анізотропії, малої неупорядкованості частинок та розміру системи на основний термодинамічний стан та намагніченість низькорозмірної фрустрованої решітки.

**Методи дослідження.** Методи включають в себе комплекс аналітичних і обчислювальних підходів для вирішення завдань дослідження:

- основного стану низькорозмірної фрустрованої решітки з застосуванням комп'ютерного моделювання класичним методом Монте-Карло;
- основного стану одновимірних систем методами зшивок і трансфер-матриць;
- термодинаміки квантових систем методом точної діагоналізації.

### **Наукова новизна одержаних результатів.**

1. Вперше встановлено, що польова залежність намагніченості фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда в рамках класичної анізотропної моделі Гейзенберга зі взаємодією найближчих сусідів має єдину особливість у вигляді « $M = 1/3$ » плато. Показано, що це плато існує тільки у випадку легковісної обмінної анізотропії, величиною якої визначається ширина такого плато.

2. Вперше встановлено, що плата « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ » на польовій залежності намагніченості у квантовій XXZ-моделі зі спіном  $S=1/2$  на фрустрованій решітці

Шастри-Сазерленда є стабільними по відношенню до зміни розмірів системи. Знайдено, що ці плати також мають місце у системі з ізотропною обмінною взаємодією між спінами.

3. Вперше виявлено структуру основного стану одновимірної системи електронів, яка задана на решітці-матриці, при малій неупорядкованості її вузлів. Показано, що при низькій концентрації електронів цей стан відповідає основному стану спінового ланцюжка у випадковому зовнішньому полі, він є неупорядкованим і має структуру феромагнітних доменів, які випадково чергуються.

4. Вперше показано, що основним джерелом динамічної нестійкості фази вігнеровського кристалу електронів над поверхнею рідкого гелію є процес випаровування. Встановлено, що він відбувається термоактиваційним шляхом при низькій концентрації електронів і за рахунок тунелювання електронів в області високих концентрацій.

**Практичне значення отриманих результатів** полягає у тому, що отримані термодинамічні особливості та структури основних станів вивчених моделей можуть бути використані при розробці теорії низьковимірних неупорядкованих фрустрованих речовин і для прогнозування їх теплових, магнітних і провідних властивостей. Розрахунки, які приведено в дисертації, можуть бути застосовані для розробки теорії низьковимірних багаточастинкових систем з безладом та фрустраціями. Знайдений у дисертації основний стан системи електронів на одновимірній неупорядкованій решітці-матриці є характерним для всіх одновимірних неупорядкованих систем. Запропонований механізм руйнування вігнеровського кристалу дозволяє якісно пояснити дані низькотемпературних експериментів щодо системи електронів над поверхнею рідкого гелію. Дослідження решітки Шастри-Сазерленда дозволяє передбачати нові властивості рідкісноземельних магнітних речовин.

**Особистий вклад здобувача.** У всіх роботах, які увійшли до дисертації та виконані у співавторстві, дисертант приймав активну участь у постановці задач, обговоренні, трактуванні отриманих результатів, формулюванні висновків та написанні статей. Автором особисто проведено аналітичний опис основних станів двовимірної фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда та неупорядкованих одно- і двовимірних систем електронів. Дисертантом самостійно виконано обробку чисельних даних та аналіз основного стану системи електронів на одновимірній неупорядкованій решітці-матриці та знайдено аналітичні залежності параметрів системи від ступеню неупорядкованості. Дисертантом особисто проведено чисельне моделювання магнітних станів двовимірної решітки Шастри-Сазерленда. Дисертант самостійно виконав чисельні розрахунки станів вігнеровського кристалу на поверхні рідкого гелію з використанням багаточастинкової моделі і показав, що руйнація основного стану відбувається за рахунок термоактивації та тунелювання. Таким чином, особистий внесок дисертанта у цій роботі є визначальним.

**Апробація результатів дисертації.** Матеріали, що складають зміст дисертації, доповідались на таких наукових конференціях:

- VI Международная научная конференция для молодых ученых: Современные проблемы математики и ее приложения в естественных науках и информационных технологиях, 17–22 апреля, 2011 г., Харьков, Украина;
- II Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2011): International Conference for Young Scientists, June 6–10, 2011 p., Kharkiv, Ukraine;
- III Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2012): International Conference for Young Scientists, May 14–18, 2012, Kharkiv, Ukraine;
- 12-та Всеукраїнська школа-семінар зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 30 травня – 1 червня 2012 р., Львів, Україна;
- IV Young Scientific Conference: Modern problems of theoretical physics, October 23–26, 2012, Kiev, Ukraine;
- Міжнародна конференція молодих вчених і аспірантів, ІСФ-2013, 20–23 травня 2013 р., Ужгород, Україна;
- IV Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2013): International Conference for Young Scientists, June 3–7, 2013, Kharkiv, Ukraine;
- VI Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2015): International Conference for Young Scientists, June 2–5, 2015, Kharkiv, Ukraine.

**Публікації.** Матеріали дисертації своєчасно та повністю опубліковано у 13 наукових працях, з них 5 статей у провідних фахових журналах [1-5] і 8 тез доповідей [6-13] на вітчизняних та міжнародних конференціях.

**Структура та обсяг дисертації.** Дисертаційна робота складається з вступу, чотирьох розділів основного тексту з рисунками, висновків та списку використаних джерел. Обсяг дисертації становить 119 сторінок, містить 19 рисунків, список використаних джерел з 109 найменувань займає 11 сторінок.

## **ОСНОВНИЙ ЗМІСТ ДИСЕРТАЦІЇ**

У **вступі** обґрунтовано актуальність теми дисертаційної роботи, визначено мету й задачі досліджень та методи їх досягнення, сформульовано основні положення і результати роботи, розкрито наукове та практичне значення результатів, наведено дані про публікації, особистий внесок дисертанта, апробацію роботи та описано структуру дисертації.

У **першому розділі** «Властивості фрустрованих систем (огляд)» зроблено огляд робіт, що стосуються теми дисертації. Наведена історія дослідження фрустрованих низьковимірних систем та ефектів, які вони проявляють. Обговорені класичні та квантові моделі, що описують фрустровану поведінку. Цитуються найважливіші роботи, які дали поштовх вивченню фрустрованих систем.

Під терміном фрустровані системи розуміють такі, в яких мінімум енергії не може бути реалізований шляхом мінімізації парних енергій складових взаємодій. Для всіх таких систем типова висока ступінь виродження основного



стану. Існують два умовних типу фрустрацій – геометрична і невідповідна.

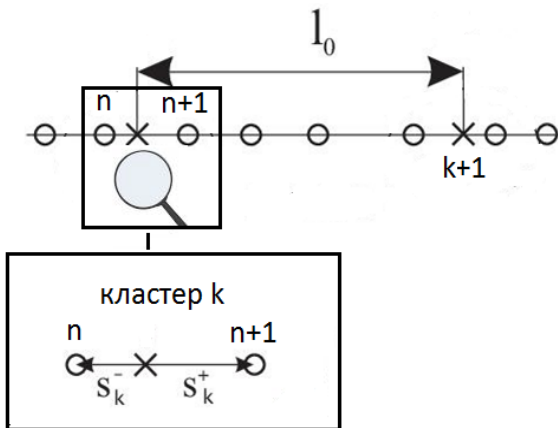
Однією з цікавих геометрично фрустрованих систем є модель Ізінга на трикутній решітці з антиферромагнітною взаємодією (G. H. Wannier, 1950). Примітно, що елементарною коміркою такої решітки є плакет, що являє собою найпростіший приклад геометричної фрустрації.

Фрустрація виникає у багатьох моделях спінового скла, найбільш відома з яких – модель Шеррінгтона-Кірпатріка (D. Sherrington, S. Kirkpatrick, 1975), а також у деяких решіткових системах з дефектами.

У другому розділі «Одновимірні невідповідні фрустровані системи» розглянуто механізми порушення трансляційної симетрії у системі частинок на невідповідній решітці-матриці. Електрони у випадку регулярного розташування вузлів решітки утворюють одновимірний узагальнений вігнерівський кристал. Показано, що мале відхилення вузлів від регулярних положень порушує структуру основного стану такого кристалу.

Гамільтоніан, коли концентрація частинок мала, включає тільки взаємодію між ними, та має вигляд:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(n, m) n_n n_m \quad (1)$$



де  $n_n, n_m$  – це число частинок на вузлах  $n$  та  $m$ , відповідно ( $n_n, n_m = 0, 1$ ). Потенціал взаємодії  $V(n, m)$  залежить лише між відстані між частинками. Така система має гамільтоніан системи спінового ланцюжка:

$$H = \sum_{k=1}^N (s_k - s_{k+1})^2, \quad (2)$$

Рис. 1. Одновимірна невідповідна решітка-матриця та електронні кластери. Положення електронів в ідеальному вігнерівському кристалі позначено хрестиками. Внизу наведено кластер  $k$  в більшому масштабі.

де спін  $s_k$  може приймати значення:

$$s_k = \begin{cases} s_k^+ = 1 - A \xi_k^+ \\ s_k^- = -(1 - A \xi_k^-) \end{cases} \quad (3)$$

Тут  $\xi_k^\pm \in [0, 1]$  - випадкові числа, що характеризують розкид вузлів решітки-матриці біля  $k$ -ї частинки,  $A$  – коефіцієнт невідповідності. Поява доменів у ефективній спіновій системі є ознакою руйнування трансляційної симетрії основного стану кристалу.

Основний стан отримано декількома різними чисельними методами, що давали результати, які узгоджуються між собою. Метод “зшивання” дає

найточніший результат. Основна ідея полягає в багатократному розбитті системи на підсистеми та пошук для кожної підсистеми стану, в якому енергія є мінімальною, а далі — з'єднання всіх підсистем як цілого. Розбивати ланцюжок потрібно таким чином, щоб граничні спіни входили до двох підсистеми одночасно. Тоді зшивання означатиме, що напрямок спіна в граничному вузлі збігається на обох границях. Варто відзначити, що при деяких способах розбиття всієї системи, подальше з'єднання отриманих рішень стає неможливим. У таких випадках необхідно вибрати інший спосіб розбиття.

Показано, що якщо концентрація частинок досить мала, то будь-яке розупорядкування в позиціях вузлів решітки-матриці призводить до формування "доменів" з частинок і руйнує дальній порядок, властивий вігнерівському кристалу при відсутності неупорядкованості. Природа доменів може бути пояснена за допомогою формули Хаббарда:

$$x_k = a_0 \left[ \frac{k}{c_e} + \varphi \right], k = 1, \dots, N, \quad (4)$$

Тут  $x_k$  — координата частинки з номером  $k$ ,  $\varphi$  — довільна фаза, що відповідає за вибір початку координат,  $a_0$  — відстань між вузлами решітки-матриці. Основний стан має періодичну структуру з концентрацією електронів  $c_e = p/q$ . Тут  $p$  — кількість електронів на елементарну комірку,  $q$  — розмір комірки (кількість вузлів решітки-матриці, що містить частинки).

У разі трансляційно-інваріантної решітки у формулі (4) є довільна константа  $\varphi$ . У разі ж неупорядкованості, кожен домен характеризується своєю певною фазовою константою.

Середня довжина домену  $l_{dom}$  є функцією коефіцієнту  $A$ . Залежність від  $A$  була розрахована чисельно та аналітично, з використанням центральної граничної теореми. Скориставшись тим, що флуктуація енергії на одному вузлі всередині домену є випадковою величиною, можна записати імовірність того, що енергія флюктує достатньо для утворення доменної стінки. Знаючи цю імовірність, можна розрахувати середню кількість вузлів, що необхідні для такого значення флуктуації.

Отримане аналітично значення параметрів  $A_0$  і  $d$  дуже добре узгоджуються з чисельним:

$$A_0 \approx 2.27 \\ d = 4.$$

Концентрація доменів описується формулою:

$$c_{dom} = (A/A_0)^d.$$

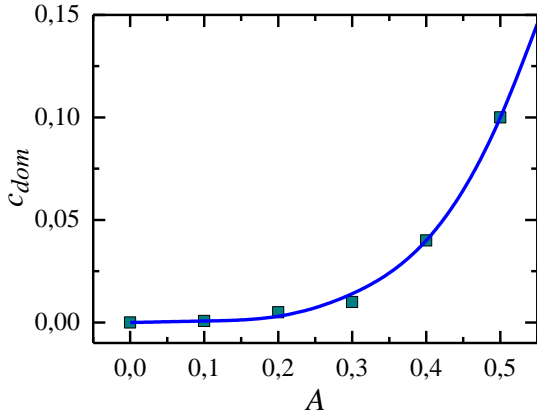


Рис. 2. Залежність концентрації доменів, як функції параметра розупорядкування  $A$ . Заповнені символи – результати чисельного моделювання. Крива – апроксимація функцією  $c_{dom} = (A/A_0)^d$ .

взаємодії електронів набагато перевершує їх кинетичну енергію. Критерієм цієї умови є нерівність  $\Gamma > 137$ , де  $\Gamma = e^2 (\pi n_s)^{1/2} / T$  – так званий фундаментальний параметр,  $e$  – заряд електрону,  $n_e$  – концентрація електронів у ВК, а  $T$  – температура. Гамільтоніан для системи електронів над поверхнею гелію має вигляд:

$$H = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - e^2 \eta \sum_i \frac{1}{z_i} - eE \sum_i z_i \quad (5)$$

Перший доданок являє собою кулонівську енергію взаємодії електронів між собою. Другий доданок – енергія притягнення заряду до свого зображення в гелії. Третій доданок – енергія взаємодії електронів з полем  $E$ . Координати електронів можна записати у вигляді векторної суми радіус-вектора в площині ВК і перпендикулярно їй. Тут позначено:

$$\eta = \frac{(\varepsilon - 1)}{4(\varepsilon + 1)}, \quad (6)$$

де  $\varepsilon$  – діелектрична проникність гелію.

Низькоенергетичний спектр електронів можна описати у рамках моделі Ізінга на трикутній решітці з дальньою взаємодією. Рівні енергії всередині ями квантуються, і основному стану електронів відповідає середня відстань до поверхні гелію  $\langle z \rangle_1 \sim 114 \text{ \AA}$ , а першому збудженому  $\langle z \rangle_2 \sim 456 \text{ \AA}$ . Гамільтоніан ефективної моделі має вигляд:

$$H = \frac{e^2 \Delta^2}{8a_0^3} \sum_{i \neq j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{\rho_{ij}^3} - h \sum_i \sigma_i \quad (7)$$

На рис. 2 представлено розраховану концентрацію доменів, в залежності від параметра  $A$ .

**В третьому розділі** «Електронний кристал над поверхнею рідкого гелію. Двовимірні фрустровані системи», показано, що електронний вігнеровский кристал (ВК) над поверхнею рідкого гелію можливо розглядати, як геометричну фрустровану систему. За допомогою такого опису можна досліджувати руйнацію дальнього порядку системи.

Як відомо, упорядкований стан ВК утворюється, якщо потенційна енергія кулонівської

$$h = \frac{1}{2} \left( eE \Delta + \frac{e^2 \eta \Delta}{\langle z \rangle_1 \langle z \rangle_2} \right) . \quad (8)$$

Тут  $\Delta = \langle z \rangle_2 - \langle z \rangle_1$  – відстань між основним і першим збудженим рівнем;  $\rho_{ij}$  – безрозмірна відстань;  $a_0$  – стала решітки.

Взаємодія між частинками відбувається за законом Кулона. Зрозуміло, що в реальному кристалі збудження будь-якого електрона викликає деформацію трикутної решітки, проте будемо вважати, що цей ефект не є суттєвим і координати спіну не залежать від його енергетичного стану.

Щоб перевірити це припущення, було проведено моделювання методом Монте-Карло системи з 2500 частинок, розташованих всередині кола. Чисельно знаходилося значення поля, нижче якого основний стан не є монодомений, тобто один або кілька спінів є антипаралельними полю. Слід зазначити, що досліджувана система є кулонівською і знайдене значення критичного поля залежить від розміру системи. Наприклад, якщо взяти систему лише з двох частинок, розташованих досить близько в площині ВК, то одна з частинок буде віддалятися від іншої за рахунок переходу на більш високий рівень. Зрозуміло, що критичне поле зростає при збільшенні розміру системи, див. рис.3, а чисельне дослідження істотно ускладнюється при великій кількості частинок  $N$ .

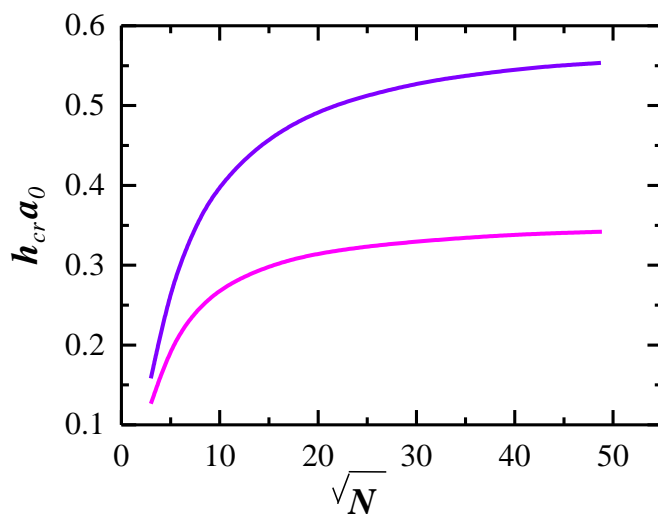


Рис. 3. Залежності критичного поля від  $\sqrt{N}$  для  $\frac{\Delta}{a_0} = 2$  (верхня крива) та  $\frac{\Delta}{a_0} = 3$  (нижня крива).

процесу та тунелювання електронів через потенційний бар'єр.

Виходячи з цього результату, мало сенс розглянути руйнування ВК на прикладі одночастинкової моделі, в якій нескінченне число електронів заповнює площину ВК. Одночастинкова модель раніше була розглянута Монарха та Вільком (Ю. М. Вільк, Ю. П. Монарха, 1987), ними було знайдено вигляд енергетичного потенціалу, в якому знаходилися частинки. Приклади такого потенціалу наведені на рис.4. В рамках цієї моделі вперше досліджено обидва механізми руйнування електронного кристалу: за рахунок термоактиваційного

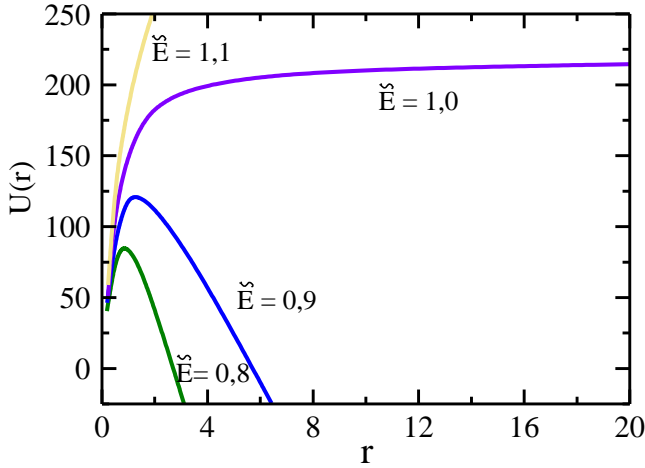


Рис. 4. Залежність потенційної енергії від відстані  $r$  при різних значеннях притискаючого поля  $\tilde{E}$ .

$\tilde{E} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} E$  та безрозмірної відстані  $r = z/a_0$  від площини кристалу, яку можна записати як:

$$f(\tilde{E}, r) = -\frac{\eta}{r} + \frac{4\pi}{\sqrt{3}} [\tilde{E}(r - \langle r \rangle_1) + \alpha - \sqrt{\alpha^2 + (r - \langle r \rangle_1)^2}] . \quad (11)$$

Константа  $\alpha = 0,6$  була отримана за допомогою Монте-Карло моделювання потенціалу системи.

Імовірність процесу тунелювання в квазікласичному наближенні визначається формулою:

$$P_2 = \exp\left(-\frac{2e\sqrt{2m_e a_0}}{\hbar} \int_{\langle r \rangle_1}^{r(\tilde{E})} \sqrt{f(\tilde{E}, r) + \frac{\eta}{\langle r \rangle_1}}\right) . \quad (12)$$

Обидва процеси, термоактиваційний і тунельний, є статистично незалежними, і, отже, повна ймовірність «випаровування» електрона дорівнює:

$$P(\tilde{E}) = P_1(\tilde{E}) + P_2(\tilde{E}) - P_1(\tilde{E})P_2(\tilde{E}) . \quad (13)$$

Зі зростанням концентрації електронів  $n_e$ , внесок тунельних процесів в загальну ймовірність їх «випаровування» збільшується. Залежність  $P(\tilde{E})$  в даному діапазоні притискаючих полів стає більш стрімкою, див. рис. 5.

Отримано імовірності термоактивації та тунелювання у квазікласичному випадку.

Імовірність термоактивації:

$$P_1 = \exp\left(-\frac{\Delta U(\tilde{E})}{k_B T}\right) = \exp\left(-\frac{e^2}{a_0 k_B T} \left(f_{ext} + \frac{\eta}{\langle r \rangle_1}\right)\right) \quad (9)$$

Тут  $k_B$  – стала Больцмана.

$$\langle r \rangle_1 = \langle z \rangle_1 / a_0,$$

$$f_{ext} = f(\tilde{E}, r_{ext}), \quad (10)$$

де  $f(\tilde{E}, r)$  – функція від ефективного зовнішнього поля

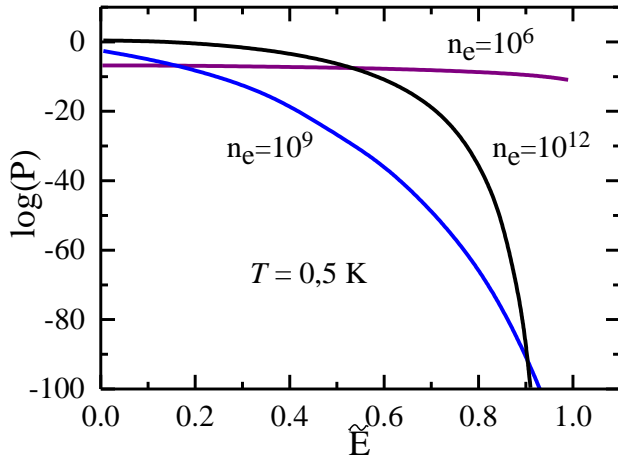


Рис. 5. Залежність ймовірності випаровування електрона  $P$  від притискаючого поля  $\tilde{E}$  при різних концентраціях електронів  $n_e$ .

стан електронів над поверхнею рідкого гелію відокремлений від області вільного руху потенційним бар'єром, параметри якого визначаються концентрацією електронів і величиною притискаючого поля. При «випаровуванні» електрони долають цей бар'єр як термоактиваційним шляхом, так і за рахунок тунелювання.

В четвертому розділі «Фрустрована решітка типу Шастри-Сазерленда», розглянуто решітку Шастри-Сазерленда (SSL), яка має властивості трикутної решітки з антиферомагнітним обміном, і демонструє свої специфічні властивості. Структура SSL може бути описана чотирма антиферомагнітними обмінами  $J$  і одним додатковим обмінним інтегралом  $J'$ , як показано на рис.6.

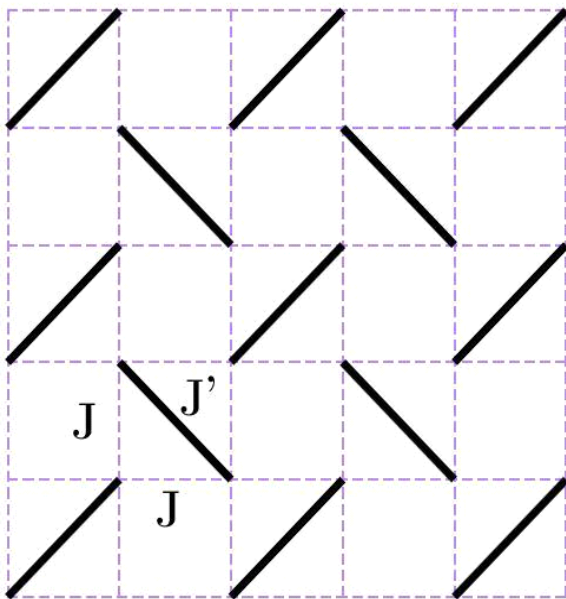


Рис. 6. Решітка Шастри-Сазерленда (M. Mooliner et al., 2009).

Вивчено механізм руйнування вігнеровського кристала на поверхні рідкого гелію в притискаючому електричному полі, меншому за поле повної компенсації заряду.

В рамках одноелектронної моделі показано, що дане руйнування відбувається за рахунок відходу (випаровування) електронів з поверхні вігнеровського кристалу. У притискаючому полі, меншому за поле повної компенсації заряду, основний

У випадку, коли  $J$  набагато більше  $J'$ , така спінова система поводить себе як звичайний антиферомагнетик; якщо ж обмін  $J'$  переважає, то система являє собою газ слабкозв'язаних димерів. Найбільший інтерес представляє собою ситуація, коли  $J$  і  $J'$  – величини одного порядку.

Одна з відмінних рис магнітної структури SSL – це східчаста поведінка залежності намагніченості від магнітного поля. Експерименти зі сполуками, що мають еквівалентні магнітні решітки, виявили низку цікавих особливостей. Наприклад, на

залежності намагніченості  $M$  від магнітного поля  $h$  спостерігаються ділянки плато. Ці плато відповідають раціональним значенням відношення  $M / M_{sat}$ , де  $M_{sat}$  – намагніченість насичення. При цьому, ці значення дорівнюють  $M / M_{sat} = 1/2, 1/3, 1/4, 1/8$  і спостерігаються в різних сполуках. Така поведінка проявляється навіть у разі ізотропної спин-спінової обмінної взаємодії. Показано, що наявність сходинок  $M / M_{sat} = 1/2, 1/3, 1/4, 1/8$  квантової моделі Гейзенберга на решітці Шастри – Сазерленда спостерігається навіть без урахування дальності.

Виявлено магнітні особливості в SSL в рамках класичної моделі за допомогою алгоритму heath-bath методу Монте-Карло. Цей алгоритм значно збільшує обчислювальну ефективність при низьких температурах в порівнянні з алгоритмом Метрополіса, що дозволило вивчати систему доволі великого розміру. Досліджено вплив співвідношення обмінних констант і анізотропії легкої осі на термодинамічні властивості двовимірної SSL з використанням Монте-Карло моделювання в рамках класичної моделі Гейзенберга.

Вивчено вплив обмінної анізотропії на особливості кривої намагніченості (плато). Відповідна залежність представлена рис. 7. Тут  $J_{xx} = J_{yy} = 1$ ,  $J'_{xx} = J'_{yy} = 2$ ,  $J_{zz} = 1 + \alpha$ ,  $J'_{zz} = 2J_{zz}$  і  $\alpha = 0.05$ . Можна бачити, що навіть слабка анізотропія (5%) призводить до істотного збільшення ширини плато. Виявилось, що криві відповідають різним розмірам системи  $48 \times 48$  і  $24 \times 24$  і знаходяться у хорошій згоді між собою. Це означає те, що граничні умови мало впливають на результат. Залежність ширини плато  $\Delta$ , що відповідає  $M = 1/3$ , від параметра анізотропії  $\alpha$  представлена на рис. 8. Залежність ширини плато  $\Delta$  від співвідношення обмінних констант  $\mu = J'/J$  наведена на рис. 9. Також досліджено квантову модель Гейзенберга на решітці SSL зі спином  $S = 1/2$  за допомогою методу точної діагоналізації. Гамільтоніан такої системи має вигляд:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & \frac{J_{xx}}{2} \sum_{\langle \vec{r}_i, \vec{r}_j \rangle} (\hat{S}_{\vec{r}_i}^x \hat{S}_{\vec{r}_j}^x + \hat{S}_{\vec{r}_i}^y \hat{S}_{\vec{r}_j}^y) + \frac{J_z}{2} \sum_{\langle \vec{r}_i, \vec{r}_j \rangle} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z \hat{S}_{\vec{r}_j}^z + \\ & \frac{J'_{xx}}{2} \sum_{\vec{r}_i, \vec{\delta}_i} (\hat{S}_{\vec{r}_i}^x \hat{S}_{\vec{r}_i + \vec{\delta}_i}^x + \hat{S}_{\vec{r}_i}^y \hat{S}_{\vec{r}_i + \vec{\delta}_i}^y) + \frac{J'_z}{2} \sum_{\vec{r}_i, \vec{\delta}_i} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z \hat{S}_{\vec{r}_i + \vec{\delta}_i}^z - h \sum_{\vec{r}_i} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z. \end{aligned} \quad (14)$$

Тут  $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$  – координати вузлів решітки;  $i = 1, 2, \dots, N$ , де  $N$  – загальна кількість вузлів. Символ  $\langle \dots \rangle$  означає підсумовування по 4-м найближчим (вертикальним і горизонтальним) сусідам.  $\vec{\delta}_i$  – радіус-вектор, що з'єднує  $i$ -й спин з його 5-м (діагональним) сусідом в решітці,  $\hat{S}_{\vec{r}_i}^x$ ,  $\hat{S}_{\vec{r}_i}^y$  та  $\hat{S}_{\vec{r}_i}^z$  – компоненти спінового оператора на вузлі  $\vec{r}_i$ .

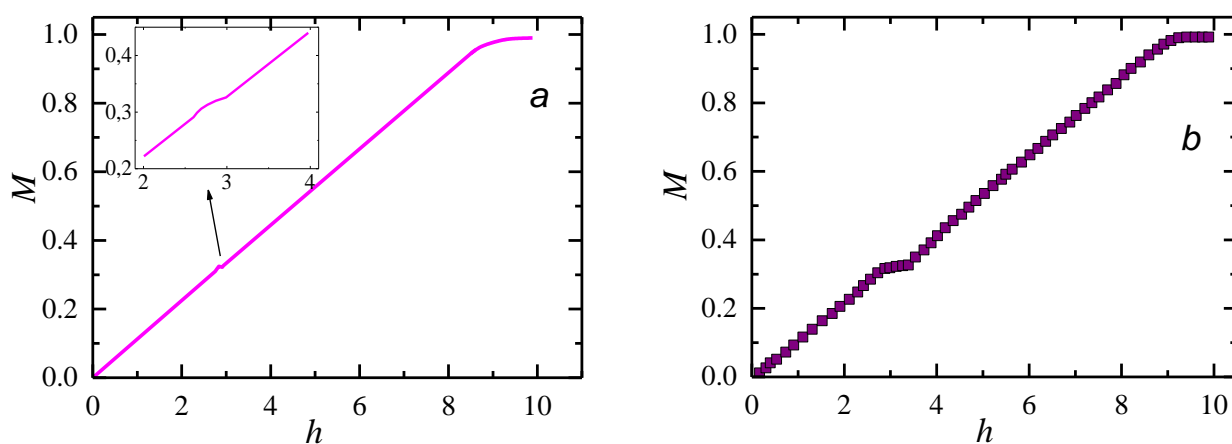


Рис. 7. Залежність намагніченості  $M$  від зовнішнього магнітного поля  $h$  у випадку магнітної ізотропії для  $\alpha = 0$  (a), та анізотропії для  $\alpha = 0.02$  (b) при  $\mu = 2$  та температурі  $T = 0,02$ . Позначення: у випадку розміру системи  $24 \times 24$  — лінія та  $48 \times 48$  — квадрати.

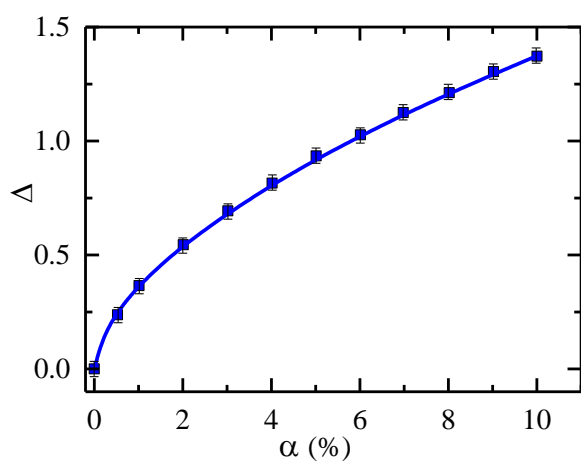


Рис. 8. Залежність ширини плато намагніченості  $\Delta$ , що відповідає  $M = 1/3$  від параметра анізотропії  $\alpha$ . Розмір системи  $24 \times 24$ ,  $\mu = J'/J = 2$  і  $T = 0.02$ .

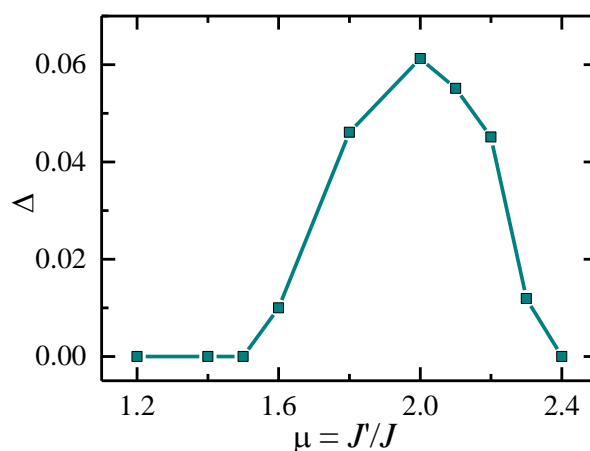


Рис. 9. Залежність ширини плато намагніченості  $\Delta$ , що відповідає  $M = 1/3$  від співвідношення обмінних констант  $\mu = J'/J$ . Розмір системи  $24 \times 24$ ,  $T = 0.02$ .



Для того, щоб вивчати системи досить великого (за мірками методу точної діагоналізації) розміру, необхідно використовувати всі інтеграли руху. Наявність інтегралів руху дозволяє виділити інваріантні підпростори в повному просторі станів досліджуваної системи і, отже, скоротити розмірності матриць, які необхідно діагоналізувати.

Простір станів при цьому розбивається на інваріантні підпростори, кількість яких дорівнює кількості власних значень вибраного інтегралу руху. Матриця  $\hat{H}$  набуває блочно-діагональну структуру і, отже, може бути записана у вигляді прямої суми:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \oplus \hat{H}_2 \oplus \dots \oplus \hat{H}_K. \quad (15)$$

Тут  $\hat{H}_K$  – оператори, діючі у відповідних інваріантних підпросторах. Тоді

$$\det(\hat{H}) = \prod_{k=1}^K \det(\hat{H}_k). \quad (16)$$

Польові залежності намагніченості були отримані таким чином. Відомо що  $[\hat{M}_z, \hat{H}] = 0$ . Це означає, що енергія будь-якого стану лінійно змінюється в зовнішньому магнітному полі, яке докладено уздовж осі  $z$ , а оскільки кожний інваріантний підпростір відповідає певному значенню магнітного моменту  $m_j$ , то:

$$\varepsilon(h) = \varepsilon - m_j h. \quad (17)$$

Тут  $\varepsilon$  – власне значення оператора  $\hat{H}_{m_j}$ , що діє в даному інваріантному підпросторі. Таким чином, щоб отримати залежності енергій від магнітного поля  $h$ , досить зробити діагоналізації системи без зовнішнього поля (тобто діагоналізації  $\hat{H}_0$ ). Знаючи залежності енергій від  $h$ , можна отримати і залежність намагніченості системи як функції зовнішнього поля –  $m(h)$ .

Основні результати були отримані при вивченні системи з лінійними розмірами  $8 \times 4$ . На рис. 10 представлені залежності наведеної намагніченості  $m^*$  від зовнішнього магнітного поля для випадку ізотропної обмінної взаємодії:  $J_z = J_{xx}$ ,  $J'_z = J'_{xx}$ . Залежність 1 відповідає випадку, коли діагональна взаємодія відсутня ( $J_z = J_{xx} = 1$ ,  $J'_z = J'_{xx} = 0$ ).

Видно, що всі плато (ступені) мають висоти, рівні  $2/N$ . Дослідження систем з різними розмірами показало, що висоти і ширини даних плато залежать виключно від розмірів системи і є наслідком її обмеженості.

Залежність 2 отримана при  $J_z = J_{xx} = 1$ ,  $J'_z = J'_{xx} = 2$ . У цьому випадку ширини плато, відповідних  $m^* = 1/2, 1/3, 1/4$ , слабо залежать від розмірів системи і, отже, відображають властивості самої моделі. Важливо відзначити, що в класичній ізотропній моделі Гейзенберга плато відсутні (існує лише особливість, відповідна  $m^* = 1/3$ ).

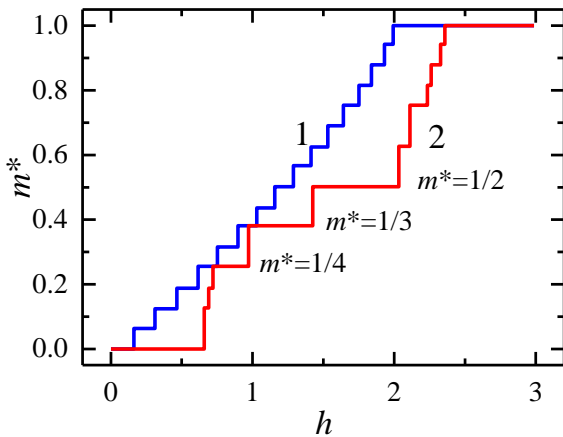


Рис. 10. Залежність приведеної намагніченості  $m^*$  від зовнішнього поля  $h$  для випадку ізотропного обмінного впливу. Залежність 1 відповідає випадку, коли діагональна взаємодія відсутня:  $J_z=J_{xx}=1$ ,  $J'_z=J'_{xx}=0$ . Залежність 2 отримана при  $J_z=J_{xx}=1$ ,  $J'_z=J'_{xx}=2$ .

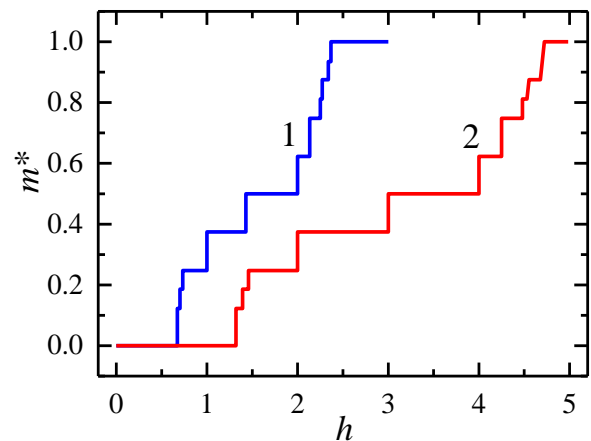


Рис. 11. Залежність приведеної намагніченості  $m^*$  від зовнішнього поля  $h$  для випадку анізотропного обмінного впливу. Залежність 1 відповідає ізотропному випадку:  $J_z=J_{xx}=1$ ,  $J'_z=J'_{xx}=2$ . Залежність 2 отримана при  $J_{xx}=1$ ,  $J_z=1.1$ ,  $J'_{xx}=2$ ,  $J'_z=2.1$ .

На рис. 11 представлені залежності  $m^*(h)$ , що відповідають різним значенням обмінної анізотропії, для системи з  $8 \times 4$  спінів. Залежність 1 відповідає ізотропній обмінній взаємодії, а залежність 2 – обмінній анізотропії типу "легка вісь" ( $J_{xx} = 1$ ,  $J_z=1.1$ ,  $J'_{xx}=2$ ,  $J'_z = 2.1$ ). Крім загального зсуву залежності в область великих полів (спін-флоп) видно, що ширини плато, відповідні  $m^* = 1/2$ ,  $1/3$ ,  $1/4$ , збільшуються. Аналогічний результат для  $m^* = 1/3$  був отриманий в рамках класичної моделі Гейзенберга.

Введемо  $J = J_z=J_{xx}$ ,  $J' = J'_z=J'_{xx}$  і позначимо їх відношення  $\alpha = J'/J$ . Залежності  $\Delta h$  відповідних  $m^* = 1/2$ ,  $1/3$  і  $1/4$ , від  $\alpha$  представлені на рис. 12. Як видно з рисунка, існують три області, які характеризуються різними типами поведінки системи. В області  $0 \leq \alpha < 1.25$  зміна  $\alpha$  не має впливу на ширини плато. Така поведінка характерна для звичайної квадратної решітки (тобто у разі, коли  $J' = 0$ ). Цю область можна умовно позначити як область "неелєвського" антиферромагнетика. Далі, в інтервалі  $1.25 < \alpha < 1.8$  відбуваються суттєві зміни ширини плато. Це область, де специфічні властивості решіток Шастри-Сазерленда проявляються повною мірою. В області  $1.8 \lesssim \alpha$ , плато  $\Delta h$  зростає для  $m^* = 1/2$ , а як для  $m^* = 1/3$ , так і для  $m^* = 1/4$  плато  $\Delta h$  зменшуються. Як результат, із зростом  $\alpha$  залишається одне плато, відповідне  $m^* = 1/2$ . Цю область можна позначити як область "димерного" антиферромагнетика – газу ортогональних димерів з антиферромагнітною взаємодією.

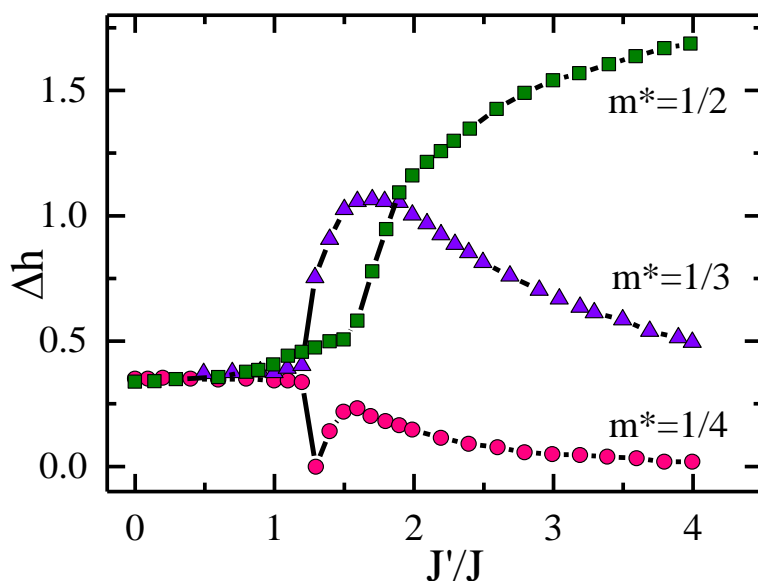


Рис. 12. Залежність ширин плато  $\Delta h$ , відповідних  $m^* = 1/2$  (квадрати),  $m^* = 1/3$  (трикутники), і  $m^* = 1/4$  (кола), від параметра  $\alpha = J'/J$

## ВИСНОВКИ

В дисертаційній роботі вирішено важливу задачу в області теоретичної фізики, а саме: теоретично описано структуру основного стану одновимірної системи електронів на неупорядкованій решітці-матриці та виявлено особливості термодинамічних властивостей двовимірної фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда.

Найбільш суттєвими оригінальними результатами дисертаційної роботи є наступні:

1. Показано, яким чином відбувається руйнація трансляційної симетрії електронного газу на неупорядкованій решітці-матриці. Показано, що в разі низької концентрації частинок основний стан має просторову структуру, яка є еквівалентною до структури різноманітних феромагнітних доменів, які випадково чергуються. Встановлено аналітичну функцію середнього лінійного розміру домену в залежності від ступеню неупорядкованості.
2. Вперше було показано, що процес тунелювання в двовимірній системі електронів високої щільності над поверхнею рідкого гелію є основним джерелом динамічної нестійкості фази вігнеровського кристалу. Встановлено, що при низькій концентрації електронів процес термоактивації дає найбільший внесок в випаровування електронів.
3. Встановлено, що в рамках класичної моделі Гейзенберга фрустрованої решітки Шастри-Сазерленда зі взаємодією найближчих сусідів і легковісною анізотропією залежність намагніченості від магнітного поля має особливість у вигляді плато « $M = 1/3$ ». Ширина цього плато зв'язана зі ступенем

анізотропії. Показано, що у випадку ізотропної решітки або анізотропії іншого типу плато відсутнє.

4. Вперше встановлено, що залежність квантової XXZ-моделі зі спіном  $S=1/2$  на фрустрованій решітці Шастри-Сазерленда має особливості у вигляді низки плат « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ » які є стабільними по відношенню до зміни розмірів системи. Знайдено, що ці плато також мають місце у системі з ізотропною обмінною взаємодією між спінами.

## СПИСОК ОПУБЛІКОВАНИХ РОБІТ ЗА ТЕМОЮ ДИСЕРТАЦІЇ

1. Slavin V. V. Monte Carlo simulation of anisotropic Shastry–Sutherland lattice in the framework of classical Heisenberg model / V. V. Slavin, **О. О. Кривчи́ков** // ФНТ. – 2011. – Т. 37, №. 12. – С. 1264–1268.
2. Славин В. В. Влияние прижимающего потенциала на устойчивость электронного кристалла над поверхностью жидкого гелия / В. В. Славин, **А. А. Кривчи́ков** // ФНТ. – 2012. – Т. 38, №. 12. – С. 1390–1394.
3. Pastur L. A. Ground state of one-dimension repulsing particles on disordered lattice / L. A. Pastur, V. V. Slavin, A. A. Krivchikov // International Journal of Modern Physics C. – 2014. – V. 25, №8. – P. 1450028-1 –1450028-16.
4. Славин В. В. Нарушение трансляционной симметрии основного состояния электронного газа на неупорядоченной решетке – матрице / В. В. Славин, **А. А. Кривчи́ков** // Науковий вісник Ужгородського університету. Серія Фізика. – 2014. – № 35. – С. 136–142.
5. Славин В. В. Магнитные свойства квантовой модели Шастры-Сазерленда со спином  $S=1/2$  / В. В. Славин, **А. А. Кривчи́ков** // ФНТ. – 2014. – Т. 40, № 11. – С. 1260–1266.
6. Славин В. В. Изучение магнитных свойств двумерных соединений типа “Shastry Sutherland Lattice” в рамках классической модели Гейзенберга при помощи метода Монте-Карло / В. В. Славин, **А. А. Кривчи́ков** // VI Международная научная конференция для молодых ученых: Современные проблемы математики и ее приложения в естественных науках и информационных технологиях, 17–22 апреля 2011 г.: тезисы докл. – Харьков, 2011.– С. 99–100.
7. Slavin V. V. Monte-Carlo simulation of anisotropic Shastry-Sutherland lattice in the framework of classical Heisenberg model / V. V. Slavin and **О. О. Кривчи́ков** // II Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2011): International Conference for Young Scientists, June 6-10, 2011: book of abstr. – Kharkiv, 2011. – P.165.
8. Slavin V. V. The influence of pressing electric field on Wigner crystal stability / V. V. Slavin and **О. О. Кривчи́ков** // III Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2012): International Conference for Young Scientists, May 14-18, 2012: book of abstr. – Kharkiv, 2012. – P.168.
9. Славин В. В. Вплив електричного поля на стабільність електронного

- кристалу над поверхнею рідкого гелію / В. В. Славін, **О. О. Кривчіков** // 12-та Всеукраїнська школа-семінар зі статистичної фізики та теорії конденсованої речовини, 30 травня -1 червня 2012 р.: тези доп. – Львів, 2012. – С. 42.
10. Slavin V. V. The influence of external electric field on Wigner crystal stability / V. V. Slavin and **О. О. Kryvchikov** // IV Yong Scientific Conference: Modern problems of theoretical physics, October 23-26, 2012: book of abstr. – Kiev, 2012. – P. 54.
11. Пастур Л. А. Порушення симетрії в одновимірному електронному газі на невпорядкованій решітці-матриці / Л. А. Пастур, В. В. Славін, **О. О. Кривчіков** // Міжнародна конференція молодих вчених і аспірантів, ІЄФ-2013, 20-23 травня 2013 р.: тези доп. – Ужгород, 2013 р. – С. 188.
12. Pastur L. A. Symmetry breaking in one dimension electron gas on disordered host-lattice / L. A. Pastur, V. V. Slavin, **О. О. Kryvchikov** // IV Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2013): International Conference for Young Scientists, June 3-7, 2013: book of abstr. – Kharkiv, 2013. – P.126.
13. Slavin V. V. Symmetry breaking in one dimension chain / V. V. Slavin, **О. О. Kryvchikov** // VI Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2015): International Conference for Young Scientists, June 2-5, 2015: book of abstr. – Kharkiv, 2015. – P.110.

## АНОТАЦІЯ

**Кривчіков О. О. Особливості термодинамічних властивостей низькорозмірних фрустрованих систем та чисельне моделювання їх основних станів.** – Рукопис.

Дисертація на здобуття наукового ступеня кандидата фізико-математичних наук за спеціальністю 01.04.02 – теоретична фізика. – Фізико-технічний інститут низьких температур ім. Б. І. Веркіна НАН України, Харків, 2016.

Отримано структуру основного стану одновимірної системи електронів, яка задана на решітці-матриці, при малій невпорядкованості її вузлів. Показано, що основний стан є невпорядкованим і еквівалентним набору феромагнітних доменів. Вперше були отримані аналітичні залежності, які зв'язують характерні розміри цих доменів з параметром невпорядкованості. Досліджено стійкість вігнеровського кристалу електронів над поверхнею рідкого гелію. Показано, що руйнування вігнеровського кристалу в полях близьких до критичного відбувається за рахунок випаровування електронів з поверхні. Визначено, що основний внесок в випаровування в області високих концентрацій дають процеси тунелювання. Польова залежність намагніченості решітки Шастри-Сазерленда в рамках класичної анізотропної моделі Гейзенберга зі взаємодією найближчих сусідів має єдину особливість у вигляді « $M = 1/3$ » плато що існує лише за анізотропії типу «легка вісь». Показано що ширина плато зростає зі збільшенням анізотропії. Досліджено модель Гейзенберга XXZ - моделі зі спіном  $S = 1/2$  на фрустрованій решітці Шастри-Сазерленда. Залежність

намагніченості від поля для системи  $8 \times 4$  спинів являє собою низку плат. Доведено, що навіть в ізотропному випадку плати, які відповідають « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ », залишаються стабільними по відношенню до зміни розмірів системи.

**Ключові слова:** фрустрація, решітка Шастри-Сазерленда, безлад, багаточастинкові системи, низьковимірні магнетики.

## АННОТАЦІЯ

**Кривчиков А.А. Особенности термодинамических свойств низкоразмерных фрустрированных систем и численное моделирование их основных состояний.** – Рукопись.

Диссертация на соискание ученой степени кандидата физико-математических наук по специальности 01.04.02 – теоретическая физика. – Физико-технический институт низких температур имени Б. И. Веркина НАН Украины, Харьков, 2016.

В диссертационной работе рассмотрен широкий круг задач, возникающих в системах с большим количеством частиц, в случаях, когда сложная геометрия, беспорядок, или конкуренция взаимодействий приводят к фрустрациям. Было проведено исследование ряда моделей, а именно решетки Шастри-Сазерленда, треугольной решетки с дальнедействием, и одномерной неупорядоченной цепочки. Этим моделям свойственны фрустрации различного вида, наличие которых отражается на основном состоянии и термодинамических свойствах. В диссертации использовались как численные, так и аналитические подходы. При помощи численных методов были получены структуры различных состояний, которые, где это было возможно, описывались также аналитически.

Получена структура основного состояния одномерной системы электронов, которая задана на решетке-матрице, при малой неупорядоченности узлов. Показано, что при низкой концентрации электронов это состояние соответствует основному состоянию спиновой цепочки в случайном внешнем поле. Основное состояние неупорядоченно и имеет структуру ферромагнитных доменов, которые чередуются случайным образом. Данная система изучена как численно так и аналитически. Впервые были получены аналитические зависимости, связывающие характерные размеры доменов с параметром разупорядочения.

Исследована устойчивость вигнеровского кристалла электронов над поверхностью жидкого гелия. В рамках многочастичной эффективной модели, учитывающей переходы между основным и первым возбужденным уровнем, было показано, что коллективные эффекты не вносят вклад в разрушение вигнеровского кристалла в низкотемпературной области. Показано, что разрушение вигнеровского кристалла в полях близких к критическому происходит за счет испарения электронов с поверхности. Определено, что основной вклад в испарение при низкой концентрации электронов дают термоактивационные процессы, а в области высоких концентраций – процессы туннелирования. Исследована полевая зависимость намагниченности

фрустрированной решетки Шастри-Сазерленда в рамках классической анизотропной модели Гейзенберга со взаимодействием ближайших соседей. Она имеет единственную особенность в виде « $M = 1/3$ » плато. Это плато исследовано при различных типах обменной анизотропии. Показано, что оно существует лишь при анизотропии типа «легкая ось», и отсутствует во всех других случаях. Показано что ширина плато растет с увеличением анизотропии и получена зависимость ширины плато от параметра анизотропии.

Исследована модель Гейзенберга XXZ - модели со спином  $S = 1/2$  на фрустрированной решетке Шастри-Сазерленда методом точной диагонализации. Получены зависимости намагниченности от поля. Показано, что зависимость намагниченности от поля для системы  $8 \times 4$  спинов представляет собой ряд плато. Все плато были и исследованы на стабильность по отношению к изменению размеров системы. Исследован изотропный и анизотропный случай. Показано что даже в изотропном случае плато, соответствующие « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ » остаются стабильными по отношению к изменению размеров системы.

В диссертации решена задача теоретического описания основного состояния и выявления особенностей термодинамических свойств двумерной фрустрированной решетки Шастри-Сазерленда и неупорядоченных одно- и двумерных систем электронов. Выявлены общие свойства различных фрустрированных моделей. Описано, как свойства таких систем могут проявляться в реальных веществах.

**Ключевые слова:** фрустрация, решетка Шастри-Сазерленда, беспорядок, многочастичные системы, низкоразмерные магнетики.

## ABSTRACT

**Kryvchikov O.O. The peculiarities of thermodynamic properties of low-dimensional frustrated systems and the numerical simulation of their ground states.** – Manuscript.

Thesis for a candidate's degree in physics and mathematics by speciality 01.04.02 – theoretical physics. – B. I. Verkin Institute for Low Temperature Physics and Engineering, NAS of Ukraine, Kharkov, 2016.

The ground state structure of the one-dimensional electron system on a disordered host-matrix is retrieved. It is shown that the ground state structure is disordered and is equivalent to random alternate ferromagnetic domains. The dependence of these domains mean size on disorder parameter is given analytically for the first time. The stability of Wigner crystal electrons on the surface of liquid helium has been studied. It is shown that the evaporation of electrons from Wigner crystal surface causes its destruction in fields which are close to critical. The main contribution to the evaporation is determined by tunneling processes in high concentrations region. The dependence of magnetization of frustrated Shastry-Sutherland lattice on the external magnetic field is investigated in the classical anisotropic Heisenberg model with nearest neighbors interaction. The dependence has a single peculiarity of " $M = 1/3$ "

plateau. It is shown that it exists only in case of the "easy axis" anisotropy. It is shown that the width of the plateau increases with the anisotropy. The model Heisenberg XXZ-model with spin  $S = 1/2$  on frustrated Shastry-Sutherland lattice has been studied by exact diagonalization method. It is shown that the dependence of magnetization on the field for  $8 \times 4$  system spins has a number of plateaus. Even in the isotropic case the plateaus « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ » remain stable in respect to system resizing.

**Keywords:** frustration, Shastry-Sutherland lattice, disorder, multiparticle systems, low-dimensional magnets.



Формат 60x84/16. Ум. друк. арк. 0.9. Тир. 100 прим. Зам. 226-16.  
Підписано до друку 11.05.16. Папір офсетний.

Надруковано з макету замовника у ФОП Бровін О.В.  
61022, м. Харків, вул. Трінклера, 2, корп.1, к.19. Т. (057) 758-01-08, (066) 822-71-30  
Свідоцтво про внесення суб'єкта до Державного реєстру  
видавців та виготовників видавничої продукції серія ДК 3587 від 23.09.09 р.

---

**СТИЛЬ** ®  
**ИЗДАТ**   
ТИПОГРАФИЯ  
[www.stil-izdat.com](http://www.stil-izdat.com)