

**НАЦИОНАЛЬНАЯ АКАДЕМИЯ НАУК УКРАИНЫ
ФИЗИКО-ТЕХНИЧЕСКИЙ ИНСТИТУТ НИЗКИХ ТЕМПЕРАТУР
им. Б. И. ВЕРКИНА**

На правах рукописи

КРИВЧИКОВ Алексей Александрович

УДК 537.621.4; 537.624.9

**ОСОБЕННОСТИ ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИХ СВОЙСТВ
НИЗКОРАЗМЕРНЫХ ФРУСТРИРОВАННЫХ СИСТЕМ И ЧИСЛЕННОЕ
МОДЕЛИРОВАНИЕ ИХ ОСНОВНЫХ СОСТОЯНИЙ**

01.04.02 – теоретическая физика

Диссертация на соискание ученой степени
кандидата физико-математических наук

Научный руководитель
Славин Виктор Валерьевич,
доктор физ.-мат. наук, с. н. с.

Харьков – 2016

СОДЕРЖАНИЕ

СПИСОК УСЛОВНЫХ СОКРАЩЕНИЙ.....	4
ВВЕДЕНИЕ.....	5
РАЗДЕЛ 1. СВОЙСТВА ФРУСТРИРОВАННЫХ СИСТЕМ (ОБЗОР)	12
1.1. Разновидности фрустрированных систем.....	12
1.2. Магнитные неупорядоченные системы.....	14
1.3. Одномерные эпитаксиальные фрустрированные системы..	19
1.4. Разновидности двумерных электронных систем.....	21
1.5. Модель Изинга на треугольной решетке.....	26
1.6. Модель Шастры-Сазерленда.....	28
РАЗДЕЛ 2. ОДНОМЕРНЫЕ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫЕ ФРУСТРИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ.....	33
2.1. Общие свойства одномерных систем.....	33
2.2. Модель решеточного газа с отталкиванием.....	42
2.3. Метод трансфер-матриц для решеточного газа.....	46
2.4. Специфика основного состояния, численное и аналитическое описание.....	49
Выводы.....	62
РАЗДЕЛ 3. ЭЛЕКТРОННЫЙ КРИСТАЛЛ НАД ПОВЕРХНОСТЬЮ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ. ДВУМЕРНЫЕ ФРУСТРИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ.....	64
3.1. Описание двумерной системы электронов в рамках многочастичной фрустрированной модели.....	65
3.2. Устойчивость электронного кристалла.....	71
Выводы.....	80
РАЗДЕЛ 4. ФРУСТРИРОВАННАЯ РЕШЕТКА ТИПА ШАСТРЫ- САЗЕРЛЕНДА.....	83

4.1. Классическая модель Гейзенберга на решетке типа Шастры-Сазерленда.....	85
4.2. Результаты, полученные для решетки типа Шастры-Сазерленда в рамках классической модели Гейзенберга и их обсуждение.....	89
4.3. Магнитные свойства квантовой модели Шастры-Сазерленда со спином $S=1/2$	94
Выводы.....	105
ВЫВОДЫ.....	107
СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ.....	109

СПИСОК УСЛОВНЫХ СОКРАЩЕНИЙ

ВК	вигнеровский кристалл
SSL	решетка типа Шастры – Сазерленда
МК	Монте-Карло
АФ(AF)	антиферромагнетик
ФС	фрустрированные системы
t	Параметр перескока
V	потенциал
a_0	параметр решетки
c_e	концентрация
N	количество частиц
M	Намагниченность
M_{sat}	Намагниченность насыщения
J	Обменный интеграл
E	Внешнее электрическое поле
h_{cr}	Поле в точке фазового перехода
Δ	Расстояние между электронами на первом и основном уровнях
n_e	Плотность электронов
C	теплоемкость
χ	магнитная восприимчивость
\hbar	постоянная Планка

ВВЕДЕНИЕ

Актуальность темы. В последнее время в теоретической физике магнитных явлений и физике сильно скоррелированных электронных систем наблюдается значительный прогресс. Это связано с развитием численных методов исследования таких систем и ростом мощностей современной вычислительной техники. Стало возможным моделирование классических равновесных и квантовых состояний систем со сложной структурой, большим размером и большим количеством частиц. В частности, возникли новые возможности для определения основного состояния таких систем, как фрустрированные антиферромагнетики, тяжелая фермионная жидкость, спиновое стекло и спиновый лед. Сильно скоррелированные системы с геометрической фрустрацией в настоящее время вызывают значительный теоретический и экспериментальный интерес благодаря совокупности новых эффектов, которые в них наблюдаются.

Двумерные электронные системы над поверхностью жидкого гелия являются интересными объектами благодаря ряду необычных свойств. Одним из самых известных объектов данного типа является вигнеровский кристалл. Как известно, такое состояние образуется, когда потенциальная энергия намного больше, чем кинетическая. Важной проблемой оставалось исследование устойчивости вигнеровского кристалла. Как показано в работе, процесс его разрушения может быть описан в рамках многочастичной фрустрированной модели, где переходы между основным и возбужденным состоянием электронов моделируются переворотом эффективных спинов.

Низкоразмерные и слоистые узкозонные полупроводники, где носители заряда локализованы на узлах решетки-матрицы, вызывают значительный интерес благодаря ряду необычных транспортных и термодинамических

свойств. Такие системы на идеальной решетке-матрице имеют название «обобщенный вигнеровский кристалл». В реальных физических системах всегда присутствуют дефекты и примеси, наличие которых может привести к фрустрациям основного состояния и разрушению дальнего порядка.

Решетка Шастры-Сазерленда является одним из примеров системы с геометрической фрустрацией с аномальным поведением намагниченности в присутствии магнитного поля. Модель Шастры-Сазерленда и ее экспериментальная реализация привлекла внимание после обнаружения аномального поведения редкоземельных тетраборидов в магнитном поле. Важным является выявление общих свойств таких фрустрированных моделей, как система электронов на неупорядоченной решетке-матрице, система электронов на поверхности жидкого гелия, и решетка типа Шастры-Сазерленда, и установление их уникальных особенностей. В частности, детальное теоретическое исследование термодинамики решетки Шастры-Сазерленда может стимулировать дальнейшие теоретические и экспериментальные исследования сложных магнитных фрустрированных систем.

Таким образом, важность решения ряда вопросов в области теоретической физики, касающихся фрустраций в низкоразмерных магнитных системах и в двумерных электронных системах - вигнеровских кристаллах, обуславливает **актуальность** выбранной темы диссертационной работы как с позиции фундаментальной науки, так и с позиции практического материаловедения.

Связь диссертационной работы с научными программами, планами, темами. Диссертационная работа была выполнена в отделе теоретической физики Физико-технического института низких температур им. Б. И. Веркина НАН Украины в рамках тематического плана ФТИНТ им. Б. И. Веркина НАН Украины в соответствии с ведомственными тематиками: «Теория коллективных явлений в низкоразмерных конденсированных средах и наноструктурах» (номер

государственной регистрации 0107U000946, срок исполнения 2007-2011 г.г.), «Теоретические исследования нелинейных и квантовых явлений в наноструктурах и новых материалах» (номер государственной регистрации 0112U002642, срок исполнения 2012-2016 г.г.).

Цель и задачи исследования. *Цель* диссертационной работы заключается в теоретическом описании основного состояния и выявлении особенностей термодинамических свойств двумерной фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда и неупорядоченных одно- и двумерных систем электронов.

Для достижения поставленной в работе цели необходимо было решить следующие **задачи**:

- в рамках классической модели Гейзенберга исследовать намагниченность фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда с взаимодействием ближайших соседей;
- в рамках квантовой XXZ -модели исследовать намагниченности фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда с изотропным обменным взаимодействием между спинами;
- исследовать, каким образом происходит разрушение трансляционной симметрии электронного газа в неупорядоченной решетке-матрице с потенциалом отталкивания.

Объектом исследования в данной работе является динамика низкоразмерной фрустрированной решетки в случае фрустраций геометрического или разупорядоченного типа.

Предметом исследований является влияние легкоосной обменной анизотропии, малой неупорядоченности частиц и размера системы на основное термодинамическое состояние и намагниченность низкоразмерной фрустрированной решетки.

Методы исследований. Методы включают в себя комплекс аналитических и вычислительных подходов к решению задач исследования:

- основного состояния низкоразмерной фрустрированной решетки с применением компьютерного моделирования классическим методом Монте-Карло;
- основного состояния одномерных систем методами сшивок и трансфер-матриц;
- термодинамики квантовых систем методом точной диагонализации.

Научная новизна полученных результатов.

1. Впервые установлено, что полевая зависимость намагниченности фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда в рамках классической анизотропной модели Гейзенберга со взаимодействием ближайших соседей имеет единственную особенность в виде « $M = 1/3$ » плато. Показано, что это плато существует только в случае легкоосной обменной анизотропии, величиной которой определяется ширина такого плато.
2. Впервые установлено, что плато « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ » на полевой зависимости намагниченности в квантовой XXZ - модели со спином $S = 1/2$ на фрустрированной решетке Шастры-Сазерленда являются стабильными по отношению к изменению размеров системы. Найдено, что эти плато также имеют место в системе с изотропным обменным взаимодействием между спинами.
3. Впервые определена структура основного состояния одномерной системы электронов, которая задана на решетке-матрице, при малой неупорядоченности ее узлов. Показано, что при низкой концентрации электронов это состояние соответствует основному состоянию спиновой цепочки в случайном внешнем

поле, является неупорядоченным и имеет структуру ферромагнитных доменов, которые случайно чередуются.

4. Впервые показано, что основным источником динамической неустойчивости фазы вигнеровского кристалла электронов над поверхностью жидкого гелия является процесс испарения. Установлено, что при низкой концентрации электронов он происходит термоактивационным путем и за счет туннелирования электронов в области высоких концентраций.

Практическое значение полученных результатов заключается в том, что полученные термодинамические особенности и структуры основных состояний изученных моделей могут быть использованы при разработке теории низкоразмерных неупорядоченных фрустрированных веществ и для прогнозирования их тепловых, магнитных и проводящих свойств. Расчеты, которые приведены в диссертации, могут быть применены для разработки теории низкоразмерных многочастичных систем с беспорядком и фрустрациями. Найденное в диссертации основное состояние системы электронов на одномерной неупорядоченной решетке-матрице является характерным для всех одномерных неупорядоченных систем. Предложенный механизм разрушения вигнеровского кристалла позволяет качественно объяснить данные низкотемпературных экспериментов, касающиеся системы электронов над поверхностью жидкого гелия. Исследование решетки Шастры-Сазерленда позволяет предсказывать новые свойства редкоземельных магнитных веществ.

Личный вклад автора. Во всех работах, вошедших в диссертацию и выполненных в соавторстве, диссертант принимал активное участие в постановке задач, обсуждении, трактовке полученных результатов, формулировании выводов и написании статей. Автором лично проведено

аналитическое описание основных состояний двумерной фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда и неупорядоченных одно- и двумерных систем электронов. Диссертантом самостоятельно выполнена обработка многочисленных данных и анализ основного состояния системы электронов на одномерной неупорядоченной решетке-матрице и найдены аналитические зависимости параметров системы от степени неупорядоченности. Диссертантом лично проведено численное моделирование магнитных состояний двумерной решетки Шастры-Сазерленда. Диссертант самостоятельно выполнил многочисленные расчеты состояний вигнеровского кристалла на поверхности жидкого гелия с использованием многочастичной модели и показал, что разрушение основного состояния происходит за счет термоактивации и туннелирования. Таким образом, личный вклад диссертанта в этой работе является определяющим.

Апробация результатов. Материалы, составляющие содержание диссертации, докладывались на таких научных конференциях:

- 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 Yong Scientific Conference: Modern problems of theoretical physics, October 23–26, 2012, Kiev, Ukraine;

- Міжнародна конференція молодих вчених і аспірантів, ІЄФ-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 і повністю опубліковані в 13 наукових роботах, із них 5 статей в провідних спеціалізованих журналах [1-5] і 8 тезисів доповідей [6-13] на вітчизняних і міжнародних конференціях.

Структура і обсяг дисертації: Дисертація складається з вступу, чотирьох глав основного тексту з малюнками, висновків і списку використаної літератури. Обсяг дисертації становить 119 сторінок, містить 19 малюнків, список використаних джерел із 109 назв займає 11 сторінок.

РАЗДЕЛ 1

СВОЙСТВА ФРУСТРИРОВАННЫХ СИСТЕМ (ОБЗОР)

1.1. Разновидности фрустрированных систем

Под термином фрустрированные системы понимают системы, минимум энергии которых не может быть реализован путем минимизации парных энергий взаимодействий составляющих эту систему частиц [14,15]. Для всех таких систем типична высокая степень вырождения основного состояния. Существуют 2 типа фрустраций – геометрическая и неупорядоченная. В различных магнитных системах могут проявляться оба типа фрустраций, именно поэтому крайне важно изучать такие системы. Диссертационная работа посвящена изучению данного класса объектов.

Отличие фрустрированных систем (ФС) от соответствующих нефрустрированных отражается, прежде всего, в большом разнообразии фаз и, соответственно, фазовых переходов, что вызвано сильным вырождением и высокой чувствительностью фрустрированных систем даже к малым внешним воздействиям.

Стандартные теоретические методы исследования таких систем сталкиваются с серьезными трудностями [16, 17]. Точное решение удалось получить лишь для очень ограниченного числа моделей статистической физики [18-28]. Исследование подобных систем аналитическими методами современной теоретической физики – чрезвычайно сложная задача. Поэтому фазовые переходы и свойства ФС интенсивно исследуются численными методами теоретической физики, наиболее популярными из которых являются методы Монте-Карло (МК) и молекулярной динамики [29-35]. При помощи этих методов успешно исследуются критические свойства систем, проводится построение фазовых диаграмм в широком диапазоне температур и внешних

полей, определяются основные состояния сложных систем. Данные, получаемые такими и подобными численными методами, можно рассматривать как полученные в результате некоторого эксперимента над моделью, и судить о правомерности использования этой модели для описания реальных экспериментальных данных. Существенным преимуществом такого численного эксперимента является его высокая универсальность, то, что для проведения моделирования не обязательно наличие в системе малых параметров или каких-либо специфических особенностей. Информация, извлекаемая в результате моделирования, позволяет судить о термодинамических и транспортных свойствах системы, об ее структуре, дает совокупность характерных конфигураций или отрезок фазовой траектории в зависимости от конкретного выбранного метода и задачи. В последние годы моделирование стало совершенно самостоятельным инструментом в исследовании многих физических систем, занимающим существенное место наряду с экспериментом и аналитическим исследованием [36-38].

Метод МК применим к системам, для которых известно взаимодействие между частицами системы. В принципе, методом МК можно получить сколь угодно точные результаты в зависимости от имеющихся вычислительных ресурсов. Типичная погрешность вычислений пропорциональна корню из числа МК испытаний и контролируется в рамках самого метода [39]. В процессе МК моделирования происходит стохастическое блуждание системы в конфигурационном пространстве. Усреднение по каноническому ансамблю заменяется усреднением по конфигурациям и, таким образом, можно вычислить любую равновесную термодинамическую характеристику системы.

Одним из наиболее популярных методов Монте-Карло является метод, использующих т.н. алгоритм Метрополиса. Алгоритм Метрополиса позволяет вычислять разнообразные термодинамические характеристики изучаемых

систем. Тем не менее, он может быть использован как удобный вспомогательный инструмент при изучении транспортных свойств (динамических, релаксационных и т.д.). Во-первых, последовательность различных состояний, реализуемых в методе МК путем одночастичной релаксации, можно приближенно рассматривать и как временную (диссипативную) эволюцию системы. Во-вторых, метод МК может быть использован для качественного анализа диффузии в относительно узком температурном диапазоне, где характеристические мезоскопические частоты практически постоянны.

1.2. Магнитные неупорядоченные системы

Среди неупорядоченных фрустрированных систем особое место принадлежит так называемым спиновым стеклам [40, 41]. В спиновых стеклах отсутствует периодичность в направлениях магнитных моментов ионов. Локальная намагниченность внутри спинового стекла не меняется со временем, оставаясь «замороженной», в отличие от парамагнетиков, где магнитные моменты флуктуируют во времени. Атомные магнитные моменты имеют ненулевые средние векторные величины, направление которых определяется некоторым средним полем, создаваемым соседями; однако это поле очень сильно флуктуирует от атома к атому [42]. Часто к возникновению состояния спинового стекла приводит решеточный беспорядок, который также порождает неупорядоченность в обменах между соседними ионами.

Эдвардс и Андерсон первыми попытались построить теорию спиновых стекол [43]. Теория была основана на методе молекулярного поля, которая позволяет найти термодинамические характеристики ниже критической температуры. Это позволило объяснить особенности температурной

зависимости магнитной восприимчивости сплавов, в которых неупорядоченность играет ключевую роль [44]. Однако эта теория сталкивалась со многими трудностями в аспекте изучения кинетики релаксаций возбуждений. Тем не менее, теория Эдвардса-Андерсона дала толчок к развитию микроскопической теории, не использующей каких-либо предположений о природе основного состояния.

Полученные за последнее время обширные экспериментальные данные свидетельствуют о том, что спиновое стекло – это особое магнитное состояние вещества, обладающее уникальными свойствами. Можно сказать, что это происходит из-за нарушения эргодичности, так как за конечные времена система может перейти лишь в квазиравновесное состояние. Это и является причиной того, что макроскопическая теория стеклования, подобная теории фазовых переходов Ландау, до сих пор не создана. Представление о потере эргодичности в спиновом стекле требует описания распределений для микросостояний во всех областях фазового пространства. Это не может быть учтено лишь единственным параметром, таким как параметр порядка. Поэтому существуют такие характеристики, как, параметр памяти в теории Эдвардса-Андерсона, и параметр неэргодичности Альмейды-Таулесса [45].

Следует отметить, что в настоящее время для исследования подобных систем все больше прибегают к микроскопическому описанию, в связи со многими противоречиями феноменологической теории. Свойства спиновых стекол изучены достаточно хорошо в рамках отдельных теоретических моделей, одной из самых популярных из которых является модель Шеррингтона – Кирпатрика [20].

$$H = - \sum_i J_{ij} \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \sigma_i \quad (1.1)$$

Здесь $\sigma_i = -1, 1$ — изинговские спины, обменные константы J_{ij} являются случайными, нормально распределенными величинами, h - внешнее магнитное

поле. В модели существуют фрустрации из-за невозможности минимизировать все взаимодействия одновременно. Авторами [20] были найдены термодинамические величины при малых внешних полях при помощи метода реплик.

Как известно, в неупорядоченных системах термодинамические величины, получаемые путем стандартного усреднения по ансамблю, могут зависеть от реализации. (Так, например, в случае спиновых стекол свободная энергия на частицу в термодинамическом пределе зависит от реализации.) По этой причине необходимо проводить дополнительное усреднение термодинамического потенциала (логарифма статистической суммы) по всем реализациям..

Де Альмейда и Д. Таулес [45] исследовали на устойчивость решения модели Шеррингтона – Кирпатрика. Для этого исследовались стационарная точка свободной энергии при помощи метода самого крутого спуска (steepest descent). Найдено, что хотя эта точка и является минимумом свободной энергии при высоких температурах, однако, при низких температурах, в ферромагнитной фазе и фазе спинового стекла она является неустойчивой. Возникает нестабильность в присутствии магнитного поля. Получены [45] линии устойчивости различных фаз, $T(H) \sim H^{3/2}$. Однако решение было применимо лишь для малых магнитных полей.

Одним из мощных инструментов для вычисления термодинамических характеристик неупорядоченных систем является метод реплик, подробно описанный в работе [46]. Для каждой реализации случайного распределения обменных констант (т.н. реплики) любая макроскопическая величина будет единственной и при усреднении по всем репликам она даст правильное значение для измеряемой величины во всей системе. В работе Паризи [46] метод реплик был усовершенствован, и получено решение, пригодное и для

больших полей. Существует множество обобщений модели Шеррингтона – Кирпатрика, исследуемые в основном численными методами, при учете анизотропии, размерности решётки, радиуса взаимодействия. Франц продолжил работы Паризи по изучению спиновых стекол, изучая обобщения модели Шеррингтона – Кирпатрика. В работе [47] изучено поведение одномерных спиновых стекол с дальнодействием, но конечным радиусом взаимодействия в зависимости от дальности взаимодействия. В этой работе также проведено Монте-Карло моделирование для подтверждения перехода из фазы спинового стекла в фазу парамагнетика; исследовано поведение корреляций и найдено, что корреляции растут быстрее, чем радиус взаимодействия; охарактеризовано возрастание корреляций в фазе спинового стекла.

В обзоре Франца [47, 48] рассмотрены модели спинового стекла для систем с конечным радиусом взаимодействия. Исследования проведены при помощи метода среднего поля. Описаны зависимости между этими моделями в рамках модели среднего поля.

Как указывалось выше, фрустрированные системы характеризуются наличием большого количества фаз. В неупорядоченных системах такие фазы могут характеризоваться степенью разупорядочения (параметром Эдвардса-Андерсона). Термодинамическая стабильность упорядоченных фаз зависит от энтропии и энергии. В спиновых системах качественно это определяется типом доменных стенок и их модами. Так, создание домена требует некоторой энергии, которая зависит от узлов, на которых доменная стенка может возникнуть. Чем больше размерность системы, тем больше узлов, участвующих в формировании стенок, следовательно, тем ниже выигрыш в энергии. Таким образом, размерность пространства определяет характер фазовых переходов, а размерность d , при которой меняется этот характер, называется критической размерностью.

В континуальных системах наличие фазовых переходов определяет теорема Мермина-Вагнера. В соответствии с ней, не может быть спонтанного нарушения симметрии в системах с близкодействием при конечных температурах для размерностей $d \leq 2$. Это означает, что флуктуации не требуют больших энергозатрат, и в системах с низкой размерностью, становятся слишком большими [49]. Таким образом, критической размерностью оказывается $d = 2$, для систем с непрерывной симметрией и близкодействием (см. Раздел 2.1).

В разупорядоченных системах аналогичным критерием, определяющим устойчивость фаз относительно слабого случайного воздействия, является критерий Ларкина-Имри-Ма [50]. Так, например, в работе [51] данный критерий применялся для определения критической размерности магнетиков во внешнем случайном магнитном поле.

В магнитных системах малой размерности $d < 2$, находящихся под действием бесконечно малого пространственно неупорядоченного поля, можно всегда выделить такую область, в которой энергия поля всегда больше энергии доменных стенок. Таким образом, образование доменов в системах размерности $d < 2$ энергетически выгодно, а для систем большей размерности – нет. Поэтому для систем в случайном поле $d = 2$ является критической размерностью. Точное доказательство критической размерности для модели Изинга дано Спенсером [52]. Многие модели неупорядоченных фрустрированных систем при помощи замены переменных могут быть сведены к обобщениям модели Имри-Ма [51], т. е. могут содержать в гамильтониане член, описывающий случайное поле. Одной из таких моделей является модель электронного решеточного газа на неупорядоченной решетке-матрице.

1.3. Одномерные эпитаксиальные фрустрированные системы

Первые работы по электронному газу на одномерной решетке принадлежали Хаббарду [53]. Им был предложен метод нахождения основного состояния электронных систем. Исследована одномерная трансляционно-инвариантная цепочка узлов с несоизмеримым количеством электронов на ней, обнаружено, что электроны упорядочиваются неравномерно, но периодически, что может быть рассмотрено как обобщение Вигнеровского кристалла (т.н. обобщенный вигнеровский кристалл) [54-61]. Показано, что такая неравномерность в распределении электронов по узлам порождает электрическое поле, которое может приводить к искажениям решетки реальных кристаллов. Получена т. н. формула Хаббарда

$$x_k = a_0 \left[\frac{k}{c_e} + \varphi \right], k = 1, \dots, N, \quad (1.2)$$

Здесь x_k – координата частицы с номером k , φ – произвольная фаза, отвечающая за выбор начала координат, a_0 – расстояние между узлами решетки-матрицы. Основное состояние имеет периодическую структуру с концентрацией $c_e = p/q$. p – количество электронов на элементарную ячейку, q – размер ячейки (количество узлов решетки матрицы, содержащей p частиц).

Важный шаг в исследовании данных систем сделали Синай и Бурков [54]. Было показано, что нуль-температурная зависимость концентрации частиц от химического потенциала представляет собой фрактальную структуру типа “чертовой лестницы”. Это значит, что рациональным значениям концентраций соответствует целый промежуток значений химического потенциала, в то время как иррациональным значениям – лишь одна точка. В [54] показано, как построить основное состояние для любой концентрации. Получена формула, определяющая все фазовые переходы в системе.

$$\Delta\mu = \sum_{k=1}^{\infty} u(kq + 1) - 2u(kq) + u(kq - 1) \quad (1.3)$$

$u(x)$ – потенциал взаимодействия между частицами. Примечательно, что количество электронов за период ВК p не входит выражение для $\Delta\mu$.

Бак и Бруинсма [55] получили точный результат, показывающий, что чертова лестница возникает и в одномерной модели Изинга с дальнедействующим антиферромагнитным взаимодействием.

Показано, что чертова лестница может порождаться не только лишь выпуклыми потенциалами [56]. Потенциал, используемый в этой работе, моделирует поглощение с поверхности кристаллов. Не смотря на вид потенциала, зависимость плотности частиц от химического потенциала представляет собой фрактальную структуру типа чертовой лестницы.

Термодинамические характеристики одномерных решеток электронов при учете взаимодействия только между ближайшими частицами были изучены в работе Славина и Слуцкина [50]. Было показано, что корреляции в структуре позиций электронов на решетке узлов зависят только от отношения давления к температуре. Множество фазовые переходов от слабо неидеального газа к электронному кристаллу также контролируются отношением давления к температуре. При нулевой температуре эти фазовые переходы образуют чертову лестницу на зависимости концентрации частиц от химического потенциала. В работе показано, что носителями заряда в кристалле являются дискретные солитоны с дробным зарядом.

В следующей их работе [57] изучена та же система на разупорядоченной решетке, когда средние межэлектронные расстояния значительно превышают расстояния между узлами решетки матрицы (т.е. в пределе низкой концентрации частиц). Разработана компьютерная процедура для расчета термодинамических характеристик системы, основанная на представлении статистической суммы в виде произведения трансфер-матриц со случайными

элементами и предложен метод, позволяющий изучать характеристики системы без анализа корреляционных функций основного состояния. Решеточные структуры выбирались различными: от полностью хаотических до упорядоченных. Установлено, что для любой степени разупорядочения энтропия и теплоемкость стремится к нулю линейно при понижении температуры (теорема Нернста). Показано, что в условиях 2^1 сходящееся малой неупорядоченности решетки дальний порядок в системе разрушен фрустрациями, аналогичными фрустрациям двумерных и трехмерных спиновых стекол. Показано, что фрустрации существуют при довольно малых отклонениях узлов решетки матрицы.

В работах Славина [58-61] изучено влияние дальнего действия на термодинамические свойства в случае отталкивания между частицами. Обнаружена бесщелевая структура спектра элементарных возбуждений, в системе с фрустрациями. Установлена неустойчивость основного состояния к случайной малой неупорядоченности. Эта неустойчивость обусловлена схожестью данной системы с системой Имри-Ма и ведет к нарушению дальних корреляций. Также произведено обобщение данной системы на случай учета взаимодействия с произвольным числом соседних частиц. Показано, что увеличение числа взаимодействий с соседями приводит к появлению более мелких ступенек в зависимости плотности частиц от химического потенциала. Эти ступеньки являются остатками чертовой лестницы, которая характеризует систему при нуле температур.

1.4. Разновидности двумерных электронных систем

Электронные решеточные (эпитаксиальные) системы изучались и в двумерном случае [62, 63]. Было показано, что в узкозонных системах при достаточно слабом экранировании потенциала межэлектронного отталкивания

образуется т.н. «замороженная электронная фаза» [64]. Точным критерием возникновения такой фазы является выполнение условия

$$t \ll \delta U - \frac{e^2 a_0}{r^2} \quad (1.4)$$

где t – интеграл перескока, a_0 – период решетки матрицы, δU .- вариация кулоновской энергии при переходе электрона с узла на узел.

Замороженная электронная фаза существенно отличается от вигнеровского кристалла, поскольку имеет динамическую природу локализации электронов и, следовательно, не может быть разрушена температурой (разумеется до тех пор, пока влияние фононов на саму решетку-матрицу можно считать пренебрежимо малым).

Проведенное Монте-Карло моделирование такой системы в классическом пределе (интеграл перескока t принимался равным нулю) показало, что при произвольной концентрации электронов основное состояние представляет собой набор электронных «полос», строго периодически распределенных в одном направлении и расположенных в соответствии с формулой Хаббарда [53] (полученной для одномерных систем) в другом. Конкретные направления периодичности и формирования хаббардовской структуры зависят от концентрации электронов и геометрии решетки-матрицы. Таким образом, было показано, что имеет место эффективная одномеризация - основное состояние двумерных электронных систем на упорядоченной решетки-матрице может быть описано в терминах одномерной модели Хаббарда [53].

В двумерном случае для образования вигнеровского кристалла не обязательно иметь решетку-матрицу узлов, на которых могут находиться электроны.

В полупроводниках, точно так же как и в металлах, волновые функции электронов могут быть размазаны по значительной области. Отличительной

особенностью двумерных кулоновских систем является то, что существует переходная область, в которой электроны не являются локализованными, но их волновые функции существенно отличаются от блоховских. Это область называется вигнеровской жидкостью. При переходе Мотта электронная жидкость кристаллизуется, т.е. возникают дальние пространственные корреляции. Электроны локализуются в областях меньше межэлектронного расстояния. Двумерный электронный кристалл имеет гексагональную решетку, вследствие центральной симметрии сил Кулона. Переход Мотта чаще всего рассматривают по кинетической энергии t , т.е. при кинетической энергии ниже критического значения основное состояние системы представляет собой кристалл.

Другой интересной системой, позволяющей изучать двумерные электронные комплексы, является жидкий гелий [65,66]. Именно из-за его квантовых свойств в жидком состоянии оказывается энергетически не выгодно попадание частиц в жидкость. При попадании в сосуд с гелием электроны притягиваются к жидкости силами изображения и конденсируются на ее поверхности. Такая система характеризуется отсутствием примесей и дефектов, которые могли бы затруднить изучение электронного кристалла. Однако, в зависимости от температур и плотностей электронов, на поверхности волновые функции электронов могут не перекрыться, и частицы окажутся не скоррелированными. В этом случае на поверхности возникнет электронная жидкость. Параметр $\Gamma = \frac{1}{2} \cdot \frac{\pi n_s e^2}{T}$ определяет, в каком из состояний находится электронная система. При значении $\Gamma > 137$ система находится в кристаллическом состоянии. E — заряд электрона, n_e — концентрация электронов, а T — температура.

Крэндэлл и Вильямс [67] впервые предположили, что гамильтониан электронов на поверхности жидкого гелия может минимизироваться при их

упорядочении в двумерный электронный кристалл. Кристаллизация возможна в том случае, когда потенциальная энергия больше кинетической.

Хотя системы электронов на поверхности гелия изучались и ранее [67, 68] первыми представили экспериментальные доказательства перехода электронной жидкости в кристалл на поверхности жидкого гелия Граймс и Адамс [69]. В эксперименте они наблюдали фазовый переход, для которого вычислили соответствующее ему значение Γ .

Одна из первых теорий о плавлении вигнеровского кристалла была разработана Таулесом и Костерлицом в работе [70]. Эта дислокационная теория позволяла описывать непрерывный фазовый переход, свойственный двумерным системам, без резких изменений термодинамических свойств. В его теории предполагается отсутствие изолированных дислокаций при низких температурах, а точка плавления определяется сменой знака у свободной энергии дислокации. Были выяснены возможности плавления этого электронного кристалла в зависимости от температуры.

В двумерных электронных системах взаимодействие может медленно убывать с расстоянием в силу слабой экранировки. Это означает, что необходимо учитывать взаимодействие каждой частицы со всеми остальными частицами системы. Специфика электронных систем проявилась и при учете устойчивости кристалла. Оказалось необходимым приложить прижимающее внешнее поле, перпендикулярное поверхности, а также запирающее поле, которое бы препятствовало разбеганию электронов на края сосуда. Если прижимающее поле меньше определенного критического значения, то частицы начинают покидать кристалл. Это поле называется критическим. В работе [71] рассмотрено влияние энергии всего кристалла на внедрение или изъятие одной частицы.

Интересной оказалась экспериментальная работа Наседкина и соавторов

[72], в которой система электронов изучалась под полями меньшими критического. Использовалась ячейка с круговой геометрией, которая представляла собой плоский конденсатор, в котором находится жидкий гелий. Поверхность заряжалась при помощи поджога нити накаливания. Также есть два кольцевых электрода, внешний и внутренний. На внешний электрод подается переменный ток 25 мГц, который вызывает ток в слое электронов, эффективная масса электронов при таких частотах очень близка к массе свободного электрона. Электроны взаимодействуют с прижимающим полем, после чего выходной сигнал детектировался при помощи внутреннего кольца. Измерялся сдвиг фаз и амплитуда выходного напряжения в зависимости от прижимающего напряжения. По полученному отклику в полях меньших критического авторы [72] обнаружили новое состояние, при температурах значительно ниже температуры плавления. При повышении поля снова возникал вигнеровский кристалл с меньшей концентрацией.

Точно также как одномерной цепочке электронов на разупорядоченной решетке можно сопоставить магнитную систему, так и двумерной электронной системе соответствует своя фрустрированная система (см. раздел 2). Отличительной особенностью двумерных кулоновских систем является то, что для образования фрустраций наличие дефектов решетки матрицы не обязательно. Аналогично одномерному случаю, гамильтониан может быть записан в терминах эффективных спиновых переменных. В этом случае решетка обладает треугольной геометрией, и фрустрация будет образовываться даже в случае полного отсутствия дефектов.

В вигнеровском кристалле над поверхностью гелия энергия электронов квантуется, и каждому энергетическому уровню соответствует свое расстояние от электрона до поверхности. Сила изображения и внешнее электрическое поле прижимают электроны к поверхности. Однако за счет силы Кулона,

температуры и туннелирования частицы могут переходить на следующие возбужденные уровни. Сопоставив вигнеровскому кристаллу модельную систему, учитывающую лишь два уровня энергии, основной и первый возбужденный, исследование значительно упрощается, что будет показано в разделе 3. А так как двумерный вигнеровский кристалл имеет гексагональную решетку, то при изучении возбуждений в такой системе можно исследовать ее магнитный аналог – модель Изинга на треугольной решетке.

1.5. Модель Изинга на треугольной решетке

Модель Изинга на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием является простейшей моделью, в которой наблюдается геометрическая фрустрация. Треугольные плакетты составляют основу и других геометрически фрустрированных решеток, таких как решетка типа Шастры-Сазерленда или решетка Кагоме. Модель Изинга на треугольной решетке интересна тем, что она достаточно хорошо исследована, и для ограниченного класса задач найдено точное аналитическое решение в рамках этой модели. Знание точных решений предоставляет определенную базу для апробирования приближенных методов, которыми можно исследовать более сложные модели.

Модель Изинга на треугольной решетке без поля была решена аналитически с использованием метода Онзагера [73]. Также в этой работе была решена решетка типа пчелиных сот, которая тоже является фрустрированной. Найдена энтропия при нуле температур и зависимость энергии от температуры. Найдено соотношение температуры и обмена, при котором происходит переход к ферромагнитному состоянию, однако в антиферромагнитном ($J < 0$) случае этот переход отсутствует.

В работе [74] найдены термодинамические функции для модели Изинга на треугольной решетке с малым количеством столбцов с использованием метода

трансфер-матриц. В отсутствие поля найдено аналитическое выражение для функции распределения для модели с любым числом столбцов. Результаты сравниваются с ранее полученным аналитическим выражением для бесконечного числа столбцов. В присутствии поля решение становится слишком сложным для общего аналитического выражения с произвольным количеством столбцов. Найдено интересное свойство системы: результат не зависит от количества столбцов, когда спин-полево взаимодействие больше спин-спинового.

При помощи высокополевого и низкотемпературного разложения функции распределения можно исследовать термодинамические свойства модели Изинга на бесконечной треугольной решетке. Получен аналитический вид термодинамических функций такой модели в отличном от нуля магнитном поле [75]. На $M(h)$ присутствует плато, соответствующее значению намагниченности $1/3$. Подобные плато были экспериментально выявлены в различных двумерных антиферромагнитных соединениях с треугольной решеткой. Для модели Изинга на участке плато стабильными оказываются конфигурации $\uparrow\uparrow\downarrow$ для каждого треугольного плакета.

Эффекты дальнего действия в такой системе были численно исследованы в работе [76]. Если обменные интегралы дальнего действия и ближнего действия имеют разные знаки, то в системе возможна еще и ферромагнитная фаза, которая наблюдается в случае доминирования ферромагнитного обмена. В случае доминирования антиферромагнитного взаимодействия система, очевидно разупорядочена. Также интересно, что в промежуточной области при некоторых соотношения параметров могут происходить переходы типа Костерлица-Таулеса.

1.6. Модель Шастры-Сазерленда

Еще одним интересным представителем класса геометрически фрустрированных систем является решетка Шастры-Сазерленда, которая обладает свойствами треугольной решетки с антиферромагнитным обменом, и демонстрирует новые, специфические свойства.

Эксперименты с такими соединениями выявили ряд интересных особенностей. Например, на зависимости намагниченности M от магнитного поля H присутствуют участки плато. Эти плато соответствуют рациональным значениям отношения M/M_{sat} , где M_{sat} - намагниченность насыщения. Последовательности составляют $M/M_{sat} = 1/2, 1/3, 1/4, 1/8$ и наблюдаются в различных соединениях.

Как отмечалось выше, первые особенности такого типа были исследованы в купратоборатах стронция $SrCu_2(BO_3)_2$. В частности в $SrCu(BO_3)_2$ были обнаружены плато, соответствующие $M/M_{sat} = 1/4, 1/3, 1/8$ [77]. Позднее в этом же соединении был обнаружен и ряд других плато намагниченности, соответствующих $M/M_{sat} = 1/k, k=2,3,\dots,9$, а также $M/M_{sat} = 2/9$ [78]. В тетрабориде тербия были обнаружены плато, соответствующие $M/M_{sat} = 1/2, 1/3$ [79]. В дальнейшем, при исследовании тетраборидов на основе различных редкоземельных ионов (Er, Tm, Ho, и.т.д) были обнаружены различные последовательности плато намагниченности [80-83].

Несмотря на то, что за последние годы появилось большое количество теоретических работ, посвященных изучению необычных свойств соединений с решеткой Шастры-Сазерленда, до сих пор нет полного понимания природы всех этих плато и непонятно, почему в одних соединениях присутствуют одни последовательности плато, а в других соединениях - другие (либо вообще отсутствуют).

Основная проблема заключается в том, что подавляющее количество аналитических моделей либо требуют существенного упрощения системы, либо плохо работают именно в том диапазоне параметров, где необычные свойства данных систем проявляются наиболее ярко. Что же касается работ, использующих вычислительные методы, то в них в основном применялись классический и квантовый методы Монте-Карло. Использование классического метода Монте-Карло обосновано при изучении тетраборидов редкоземельных ионов, поскольку в таких соединениях суммарный магнитный момент много больше единицы. Квантовый метод Монте-Карло хорошо работает при $J \gg J'$ и $J \ll J'$. В наиболее же реалистичной и интересной с точки зрения эксперимента области параметров $J \gg J'$ применение данного метода ограничено (либо вообще невозможно) из-за т.н. “проблемы знака” [5].

Отдельно следует выделить работы, в которых использовался метод точной диагонализации. Данный метод позволяет привести матрицу оператора Гамильтона к диагональному виду, т.е. найти все собственные значения и собственные функции.

Метод точной диагонализации применим при любом соотношении параметров модели, но обладает существенным недостатком - количество вычислительных ресурсов растёт пропорционально $(1/S)^N$, где N - число спинов. Это, в свою очередь, накладывает весьма жесткие ограничения на размеры изучаемых систем. Во многом по этой причине, работы, в которых использовался данный метод для изучения свойств решетки Шастры-Сазерленда, крайне немногочисленны [5, 84]. В них рассматривался случай изотропного обменного взаимодействия и изучались системы достаточно малого размера (в основном 6×4) [5].

Полное и точное решение задачи о нахождении основного состояния для модели Изинга на решетке Шастры – Сазерленда в магнитном поле было

найдено Дубленичем [85]. Было показано, что плато намагниченности $M=1/3$ является единственным дробным плато для этой модели. Однако, были найдены регионы существования страйповых структур, которые могут давать новые плато в случае учета дальнего действия. Результаты применены для описания редкоземельных тетраборидов, таких как RbV_4 , TmV_4 , ErV_4 которые проявляют свойства изинговских магнетиков.

Термодинамические свойства для модели Изинга на решетке Шастры - Сазерленда изучались с использованием метода ренорм групп [86]. Этим методом можно изучать большие спиновые системы. Для большого диапазона температур и обменных констант единственное плато намагниченности $1/3$ было подтверждено. Также исследовалась ширина плато в зависимости от температуры и силы магнитных фрустраций. Определены конфигурации спинов при нуле температур, совпадающие с найденными в работе Дубленича.

Оказалось, что для объяснения других плато $M/M_{sat} = 1/2, 1/3, 1/4, 1/8$, найденных экспериментально, модель Изинга с близкодействием оказалась непригодна. Были попытки найти соответствующие плато в классической модели Гейзенберга.

В работе Мулайнера и соавторов [87, 88] исследована классическая модель Гейзенберга на решетке Шастры-Сазерленда в присутствии магнитного поля. Тщательное изучение проведено как аналитически, так и численно, с использованием Монте-Карло моделирования. Обнаружено псевдо-плато $1/3$ для большого диапазона соотношений обменных констант. Фазовая диаграмма получена для соотношения $J'/J = 1/2$. На фазовой диаграмме отмечены области различных фаз, в частности указана область, в которой возможно существование плато намагниченности.

В своей работе Гречнев [22] развил метод Дубленича и смог точно построить основное состояние для изотропной классической модели

Гайзенберга в присутствии магнитного поля для произвольного соотношения обменных констант J'/J . Представлена фазовая диаграмма в плоскости J'/J , H/J . Намагниченность модели линейна по полю, однако показано, что анизотропия приводит к появлению плато $1/3$, соответствующая коллинеарной структуре.

Кин показал [89] что область коллинеарной фазы может быть увеличена введением легкоосной анизотропии, что приводит к уширению плато намагниченности. Изучено влияние неоднородностей введением дополнительного случайного обмена в гамильтониан.

Для классической изотропной модели Гейзенберга на решетке Шастры-Сазерленда с близкодействием в отличие от модели Изига не существует никаких плато намагниченности. Обменная анизотропия может порождать единственное плато $M/M_{sat} = 1/3$ и не приводит к появлению других плато. Лишь учет дальнего действия может привести к появлению новых плато в зависимости $M(h)$. В другой работе Кина [90] найдено плато $1/2$ при учете диполь-дипольного взаимодействия. Предсказано плато $2/3$ при низкой температуре.

Интересный подход применен в работе [91]. Для описания намагниченности в редкоземельных тетраборидах была применена модель Фаликова – Кимбела на решетке Шастры-Сазерленда. Показано, что магнитное взаимодействие электронной подсистемы с подсистемой ионов может приводить к образованию других плато помимо $1/3$.

Исследование решетки Шастры-Сазерленда в квантовом случае связано с серьезными трудностями, даже в плане моделирования. Из-за проблемы знака для квантового метода Монте-Карло не всегда есть возможность удостовериться численной проверкой полученных результатов. Часто для исследования квантовой модели Гейзенберга со спином $S=1/2$ Шастры-Сазерленда используются приближенные методы. Они основаны на интересной особенности, найденной еще в оригинальной работе [83]: в

некоторой области параметров прямое произведение димерных волновых функций спинов, расположенных на концах связей J' , является волновой функцией основного состояния.

В работе [92] используется приближение среднего поля Черна-Симонса. Проанализирована решетка Шастры-Сазерленда в терминах фермионов и получена кривая намагниченности. Для квантовой модели численно были наблюдаемы ступеньки $1/2, 1/3, 1/4, 3/4$ в разных областях параметров.

Наличие ступенек $M/M_{sat} = 1/2, 1/3, 1/4, 1/8$ квантовой модели Гейзенберга на решетке Шастры – Сазерленда без дополнительного учета дальнего действия порождает большой интерес для дальнейших исследований.

Другой интересной особенностью соединений с решеткой Шастры-Сазерленда является необычное поведение магнитной восприимчивости в области низких температур. При понижении температуры ниже температуры фазового перехода магнитная восприимчивость сначала уменьшается, а затем вновь начинает расти [84]. Существует несколько предположений, касающихся природы этого явления. Предполагается, что такое поведение магнитной восприимчивости может быть обусловлено щелью в спектре спиновых возбуждений и, как следствие, наличием “спиновой сверхпроводимости”.

Исследовались области фазового пространства в зависимости от соотношения обменных констант в работе Корбоза и Милы [93]; решетка Шастры-Сазерленда моделировалась при помощи метода бесконечно спроектируемых запутанных связанных состояний (iPEPS). Этот метод представляет собой разновидность вариационного метода с возможностью систематического контроля точности. Найдены фазовые переходы при $J/J' = 0,675$ и $J/J' = 0.765$.

В следующей их работе [94] они обнаружили последовательности плато $M/M_{sat} = 2/15, 1/6, 1/8$.

РАЗДЕЛ 2

ОДНОМЕРНЫЕ РАЗУПОРЯДОЧЕННЫЕ ФРУСТРИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ

2.1. Общие свойства одномерных систем

Спонтанное нарушение симметрии играет важную роль в физике твердого тела. Следствиями такого нарушения является изменение таких физических характеристик, как жесткость (например, ферромагнетизм в магнитных материалах), структура элементарных возбуждений и дефектов. Известно, что симметричные свойства тел меняются, например, при достижении температуры критической точки фазового перехода. В случае ферромагнетиков это означает отсутствие симметрии относительно поворотов по сравнению с парамагнетиком. Нарушения симметрии могут быть вызваны и внешними полями. В таком случае даже малое поле может частично или полностью снять имеющееся в системе вырождение.

Интересным классом систем, в которых спонтанное нарушение симметрии играет крайне важную роль, являются слабо неупорядоченные твердые тела. В этих веществах узлы решетки имеют небольшой пространственный разброс относительно идеальной (строго периодической) структуры. В таких соединениях наблюдается целый ряд фазовых переходов, параметры которых зависят от размерности системы, характера разупорядочения и ряда других факторов.

Для иллюстрации рассмотрим разновидность модели Изинга из N спинов со взаимодействием ближайших соседей с постоянным обменом $J_{ij} = J$ и полем $h_i = h$. В одномерном случае

$$H = -J \sum_i \sigma_i \sigma_{i+1} - h \sum_i \sigma_i \quad (2.1)$$

Пусть теперь вся цепочка находится в насыщенном состоянии, и пусть N - число способов, которыми можно перевернуть спин. Поэтому приращение энтропии:

$$\Delta S = \ln N, \quad (2.2)$$

а приращение свободной энергии:

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = 2J - T \ln N. \quad (2.3)$$

При больших N и конечных температурах приращение свободной энергии всегда отрицательно, поэтому насыщенное состояние в одномерной изинговской цепочке неустойчиво и фазового перехода в такой модели нет.

В случае же двумерной системы выберем произвольный контур, окружающий m спинов, и пусть он пересекает L связей с другими спинами вне контура. Переворот спинов внутри контура из насыщенного состояния вызовет приращение внутренней энергии:

$$\Delta E = 2JL. \quad (2.4)$$

Однако, при выборе контура, окружающего m спинов, на каждом шаге, выбирая новый соседний спин, существует 3 варианта выбора движения (для квадратной решетки). Поэтому существует $\sim 3^L$ вариантов выбора данной области:

$$\Delta S \sim \ln 3^L \sim L \ln 3. \quad (2.5)$$

Приращение свободной энергии может быть положительным:

$$\Delta F = \Delta E - T\Delta S = 2JL - LT \ln 3 \quad (2.6)$$

$$\Delta F > 0 \text{ при } T < \frac{2J}{\ln 3}. \quad (2.7)$$

Таким образом, в двумерных системах фазовый переход должен наблюдаться при конечных температурах.

В системах с разупорядочением определяющим является критерий Ларкина-Имри-Ма. Понять суть критерия Ларкина-Имри-Ма можно на простом примере.

$$H = -J \sum_{i,j} \sigma_i \sigma_j - \sum_i h_i \sigma_i \quad (2.8)$$

В такой модели обменное взаимодействие не меняется от узла к узлу, однако поле случайно для всех узлов. Критерий Имри и Ма является достаточно общим и подходит для систем любой размерности d . Для простоты в данном случае рассмотрим только изинговские спины. Усредненное значение поля всей системы $\sum h_i = 0$, однако, оно флуктуирует в части системы объема с линейным размером L :

$$\sum_V h_i \sigma_i \sim \Delta L^{d/2} \quad (2.9)$$

Здесь Δ - характерная амплитуда флуктуации поля. Таким образом, если флуктуации поля в этом объеме приведут к понижению энергии всей системы, то на границах этого объема образуется доменная стенка. Проигрыш энергии, вызванный образованием стенки $\sim JL^{d-1}$.

Качественно изменение свободной энергии можно записать как:

$$\Delta F \approx \Delta L^{d/2} - JL^{d-1} \quad (2.10)$$

Минимизируя свободную энергию, можно найти условие образования доменных стенок:

$$\frac{\partial F}{\partial V} = 0 = \frac{d}{2} \Delta L^{\frac{d}{2}-1} - (d-1)JL^{d-2} \quad (2.11)$$

Отсюда

$$L \sim \left(\frac{J}{\Delta}\right)^{2/(d-2)} \quad (2.12)$$

Видно, что поведение систем меняется в зависимости от размерности d . Для систем малой размерности $d < 2$, существуют конечные L , такие, при

которых энергия поля всегда больше энергии доменных стенок. Таким образом, образование доменов в системах размерности $d < 2$ энергетически выгодно, а для систем большей размерности - нет. Поэтому для систем со случайным полем $d = 2$ является критической размерностью.

Верхняя граничная размерность $d = 6$. Системы размерностью $d > 6$ хорошо описываются теорией среднего поля при любых температурах, в области фазового перехода в частности.

Особую роль в этом списке играют низкоразмерные проводящие системы, такие как, например, квазиодномерные органические молекулы и искусственно созданные массивы квантовых точек, между которыми возможно туннелирование электронов. Данный класс соединений интенсивно изучается на протяжении последних десятилетий.

Такие системы хорошо описываются разнообразными решеточными моделями, наиболее общей среди которых является т.н. обобщенная модель Хаббарда:

$$\begin{aligned}
 H = & -t \sum_n (\hat{C}_{n,\uparrow}^+ \hat{C}_{n+1,\uparrow} + \hat{C}_{n,\downarrow}^+ \hat{C}_{n+1,\downarrow}) \\
 & + U \sum_n \hat{n}_{n,\uparrow} \hat{n}_{n,\downarrow} \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(n, m) (\hat{n}_{n,\uparrow} + \hat{n}_{n,\downarrow}) (\hat{n}_{m,\uparrow} + \hat{n}_{m,\downarrow})
 \end{aligned} \tag{2.13}$$

Здесь $\hat{C}_{n,j}^+$ и $\hat{C}_{n,j}$ - операторы рождения и уничтожения электронов со спином j ($j = \uparrow, \downarrow$) на узле n в представлении вторичного квантования. Если узлы расположены периодически, то рассматривается модель Хаббарда на упорядоченной решетке-матрице. В противном случае (если узлы расположены случайным образом), речь идет о модели Хаббарда на неупорядоченной решетке-матрице.

Операторы удовлетворяют следующим коммутационным соотношениям:

$$\left. \begin{aligned} \widehat{n}_{n,j}^+, \widehat{C}_{n',j'}^+ &= \delta_{n,n'} \delta_{j,j'} \\ \widehat{n}_{n,j}^+, \widehat{C}_{n',j'}^+ &= 0 \\ \widehat{n}_{n,j}, \widehat{C}_{n',j'}^+ &= 0 \end{aligned} \right\} \quad (2.14)$$

Символом $\widehat{n}_{m,j}$ в (2.13) обозначается оператор числа электронов со спином j на узле m .

$$\widehat{n}_{m,j} = \widehat{C}_{m,j}^+ \widehat{C}_{m,j} \quad (2.15)$$

В силу (2.14)-(2.15) на каждом узле не может быть больше двух электронов, причем в случае двух частиц на узле их спины должны быть противоположного знака.

Первое слагаемое гамильтониана (2.13) описывает кинетическую энергию частиц. Второе - взаимодействие частиц на одном узле с противоположным направлением спина. Последнее слагаемое представляет собой потенциал межчастичного отталкивания (кулоновскую энергию взаимодействия).

Известно, что системы с гамильтонианом (2.13) могут обладать как металлическими, так и диэлектрическими свойствами в зависимости от соотношения параметров - так называемый переход Мотта-Хаббарда. В одномерном случае (а именно этот случай рассматривается нами) такой переход имеет место при нуле температур. Это значит, что изменение симметрии основного состояния электронной системы играет ключевую роль при этом фазовом переходе.

Как известно, в основе проводимости электронных систем лежит многочастичный механизм переноса носителей заряда. В фрустрированных системах структура спектра бесщелевая, т. к. фрустрации ответственны за многодолинное вырождение. Это вырождение может определять неэргодическое поведение таких систем. Установлено [60], что величина щели в спектре является осциллирующей функцией от обратной электронной

концентрации. Было показано, как система электронов на неупорядоченной решетке может быть сведена к аналогичной фрустрированной магнитной системе. Показано, что низкоэнергетический спектр такой системы может быть рассмотрен в качестве одномерной структуры, которая является аналогом доменов в одномерном магнетике.

Та же система исследовалась и более совершенными методами, при большом числе частиц [61]. В противовес методам компьютерного моделирования, эти методы дают точный результат. Численно изучены системы, состоящие из 10^4 - 10^5 частиц. Изучение систем состоящих из большого числа частиц особенно важно в случае слабо разупорядоченных систем с дальними корреляциями. Подтверждена бесщелевая структура низкоэнергетических возбуждений и нарушение дальних корреляций в слабо неупорядоченной системе.

В квантовом случае при изучении модели Хаббарда при определенных условиях экранировка кулоновского взаимодействия приводит к исчезновению связанных состояний и происходит переход Хаббарда-Мотта. В [95] Мотт объяснил переход кристалла из металлического состояния в диэлектрическое при изменении давления и температуры для сплошных сред.

Модель Хаббарда при сильном электрон-электронном взаимодействии $t \ll U$, где перескок практически не наблюдается, проявляет диэлектрические свойства. В случае $t=0$ очевидно, что энергетический спектр представляет собой набор локализованных состояний, между которыми существует щель, порядка U . При увеличении перескока t локализованные состояния превращаются в зоны $\sim zt$, где z – число соседей. Таким образом при некотором значении t возможна ситуация перекрытия зон, что и приводит переходу в проводящее состояние [96].

Точное решение [97] показало отсутствие перехода Мотта для модели

Хаббарда в одномерной ситуации.

Для описаний свойств обобщенного вигнеровского кристалла с учетом малого, но конечного туннелирования электронов на одномерной решетке часто применяют вариационный метод, основанный на использовании волновой функции Гуввиллера [98-101].

Изначально волновая функция Гуввиллера применялась для описания модели Хаббарда (см. раздел 2) в пределе малого U . При $t \neq 0, U = 0$ система описывается волновой функцией невзаимодействующих частиц

$$|\psi_0\rangle = e^{i\vec{k}\vec{r}} \quad (2.16)$$

Теперь предположим, что частицы слабо взаимодействуют друг с другом $t \neq 0, U \ll t$. В этом случае можно ввести волновую функцию, приближенно описывающую данную систему,

$$|\psi\rangle = e^{-\gamma\hat{U}}|\psi_0\rangle \quad (2.17)$$

Это и есть волновая функция Гуввиллера, где γ - вариационный параметр, который вычисляется при минимизации энергии.

$$E = \langle\psi|H|\psi\rangle = f(\gamma) \quad (2.18)$$

$$\frac{\partial E}{\partial \gamma} = 0 \quad (2.19)$$

Для описания обобщенного вигнеровского кристалла используют противоположный предел:

$$t = 0, U \neq 0 \quad (2.20)$$

Как указывалось выше, основное состояние одномерного обобщенного ВК определяется формулой Хаббарда

$$r(m) = a_0 \left[\frac{m}{c_e} + \varphi \right], m = 1, \dots, N, \quad (2.21)$$

$$|\psi_0\rangle = e^{ikr(m)} \quad (2.22)$$

В этом случае в качестве $|\psi_0\rangle$ выбирают функцию, описывающую основное состояние данной системы, в отсутствие перескока t .

По аналогии, при $t \ll U, U \neq 0$ волновая функция Гувиллера для обобщенного вигнеровского кристалла выглядит так:

$$|\psi\rangle = e^{-\gamma\hat{t}}|\psi_0\rangle \quad (2.23)$$

Существует три режима в зависимости от относительной силы кулоновского потенциала по сравнению с амплитудой перескока. Показано, что для очень большой амплитуды потенциала основное состояние практически неотлично от найденного Хаббардом для классической модели. Для потенциалов порядка перескока и малых потенциалов установлен вид волновой функции основного состояния. В среднем диапазоне волновая функция близка к волновой функции континуального вигнеровского кристалла, а когда амплитуда перескока доминирует, то основное состояние представляет собой малоамплитудную волну плотности заряда. Что касается спиновых степеней свободы то известно, что магнитное и зарядовое упорядочение сосуществуют при низких температурах.

Не только ферми-статистика может приводить к фрустрациям в таких системах. Так, в модели Хаббарда для систем с бозе-статистикой [62] рассмотрен однокомпонентный газ дипольных бозонов ограниченный одномерной решеткой, где диполи упорядочены так, что дипольное взаимодействие между ними максимально отталкивающее. В пределе низкого перескока получаются результаты Синая и Буркова. При помощи теории возмущений изучено влияние перескока и получена новая фазовая диаграмма. Возрастание перескока нарушает симметрию и сверхтекучесть в данной системе.

Модель Хаббарда с отталкиванием на упорядоченной решетке-матрице хорошо исследована и найдены как структура основного состояния, так и ее термодинамические свойства. Однако, как указывалось выше, необходимо учесть, что большинство реальных систем являются неупорядоченными. По этой причине вопрос о влиянии беспорядка в позициях узлов решетки-матрицы на структурные и термодинамические свойства представляется актуальным. Ниже мы покажем, что даже малый беспорядок приводит к существенному изменению структуры основного состояния и термодинамики системы.

Простейшим видом неупорядоченных систем являются системы с примесями. Существуют 2 типа примесной неупорядоченности. Первый из них, неупорядоченность отжига, соответствует ситуации когда координаты и импульсы примесных атомов занимают часть фазового пространства системы, наравне с остальными переменными. При этом частицы примеси пребывают в состоянии термодинамического равновесия с частицами среды. Такая неупорядоченность часто характерна для жидкостей, и приводит к перенормировке критических показателей. Значительный интерес в современной теории фазовых переходов вызывают исследования магнитных жидкостей со спиновым взаимодействием. Такие объекты характеризуются большим количеством возможных фазовых состояний благодаря наличию как трансляционных так и спиновых степеней свободы, которые связаны между собой. К таким системам относится и спиновое стекло, как частный случай замороженной спиновой жидкости.

Второй тип неупорядоченности – это замороженная неупорядоченность. Замороженная неупорядоченность характерна для кристаллических систем. В этом случае примесные частицы заморожены в кристаллическую структуру решетки и не находятся в состоянии теплового равновесия со средой. Магнетики, в своей структуре содержащие подобную неупорядоченность

называются разведенными. Модели магнетиков со случайными полями близки по свойствам к моделям с немагнитными примесями. Наличие немагнитных примесей приводит к беспорядку в виде пространственных флуктуаций спиновых взаимодействий. Если концентрация примесей превышает некоторую постоянную величину, то даже в трехмерном случае, ферромагнитное состояние не возникает ни при каких температурах. С повышением концентрации примесей падает температура фазового перехода, изменяются значения критических показателей. Такая же ситуация имеет место и в случае наличия случайных полей в системе. Благодаря тому, что магнитное поле нарушает симметрию системы по отношению к спиновой инверсии, статистические свойства неупорядоченных систем значительно отличаются от магнетиков со случайными спин-спиновыми взаимодействиями. Простейшим примером экспериментальной реализации магнитной системы со случайными полями может служить антиферромагнетик разведенный высоким количеством немагнитных примесей. Несмотря на количество теоретических и экспериментальных работ в области неупорядоченных систем, на сегодняшний день достоверно известны лишь некоторые свойства систем со случайными полями. Известно, что в системах размерностью $d > 6$ случайность входит как малая поправка в термодинамические величины, в то время как в системах малой размерности неупорядоченность играет ключевую роль во всех процессах.

2.2. Модель решеточного газа с отталкиванием

Мы будем рассматривать случай низкой плотности электронов, когда число частиц значительно меньше числа узлов. В этом случае среднее расстояние между узлами решетки-матрицы a_0 много меньше среднего расстояния между электронами $l_0 = a_0 L / N$ (L - длина системы, N - количество частиц)

первыми двумя слагаемыми в (2.1) можно пренебречь. В результате гамильтониан приобретает вид:

$$H = \frac{1}{2} \sum_{n \neq m} V(n, m) n_n n_m \quad (2.24)$$

Где n_n, n_m число электронов на узлах n и m соответственно ($n_n, n_m = 0, 1$). Это т.н. модель обобщенного Вигнеровского кристалла. Потенциал взаимодействия V зависит только от расстояния между частицами. В случае упорядоченной решетки-матрицы было показано, что структура основного состояния качественно не зависит от свойств V . Требуется лишь монотонность убывания этого потенциала. Кроме того, для термодинамической стабильности системы необходимо степенное убывание потенциала на больших расстояниях:

$$V(n, m) = V(|x_n - x_m|) = V(|\mathbf{r}|) \sim |\mathbf{r}|^{-(1+\sigma)} \quad \sigma > 0 \quad (2.25)$$

Здесь x_n, x_m - координаты частиц, занимающих узлы решетки-матрицы с номерами n и m . Поскольку мы рассматриваем неупорядоченный случай, то x_n ($n = 1, 2, \dots, L$) образуют множество случайных чисел так, что $\langle x_{n+1} - x_n \rangle = a_0$. Символ $\langle \dots \rangle$ обозначает усреднение по всем узлам решетки.

В низкотемпературном пределе основной вклад в термодинамику дают конфигурации, в которых электроны слабо отклоняются от своих положений равновесия, задаваемых минимумом (2.24). Очевидно, этому минимуму соответствует вигнеровский кристалл с концентрацией $c_e = 1/l_0$. В этом случае в статистической сумме можно ограничиться состояниями, в которых электроны занимают узлы решетки, прилегающие (слева и справа) к положениям минимума энергии (2.24).

Обозначим s_k^+ и s_k^- отклонения k -го электрона ($k = 1, 2, \dots, N$) от положения равновесия. Пусть s_k^+ соответствует смещению вдоль положительного направления цепочки (сдвиг вправо), а s_k^- - вдоль отрицательного направления (сдвиг влево). Естественно

$$s_k^+ + s_k^- = x_n - x_{n+1} \tag{2.26}$$

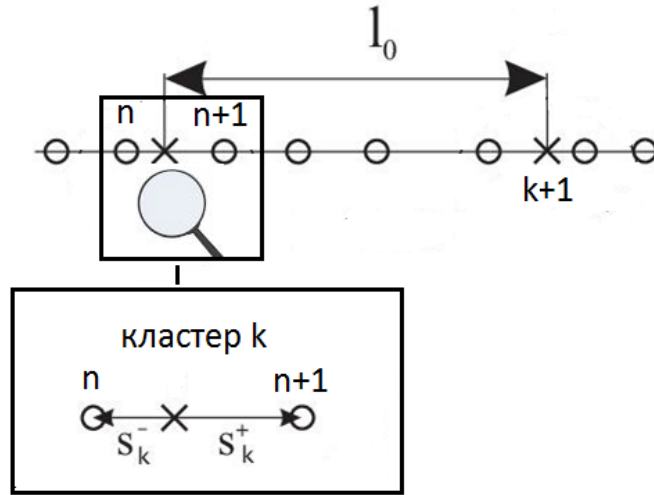


Рис. 2.1 Одномерная разупорядоченная решетка-матрица и электронные кластеры. Положение электронов в идеальном вигнеровском кристалле обозначено крестиками. Внизу приведен кластер k в большем масштабе.

В этом случае можно разложить гамильтониан (2.24) по малому параметру $\frac{s}{l_0} \sim \frac{N_e}{L}$. Здесь $s = \langle |s_k^\pm| \rangle$. В результате получаем:

$$H = H_{WC} + \frac{1}{2} \sum_{k \neq m} \frac{\partial^2 V(x)}{\partial x^2} \Big|_{x=|k-m|l_0} \left(s_k - s_m \right) \tag{2.27}$$

Переменные s_k могут принимать два значения: s_k^+ и s_k^- . Константу H_{WC} можно опустить, так как известно, что гамильтониан системы определяется с

точностью до произвольной постоянной. В приближении ближайших соседей, получаем:

$$H = b \sum_{k=1}^N (s_k - s_{k+1})^2 \quad (2.28)$$

Важно отметить, что в данном случае приближение ближайших соседей означает, что учитываются взаимодействия *ближайших частиц*, а не взаимодействия на соседних узлах решетки. Будем рассматривать периодические граничные условия:

$$s_{N+1} = s_1 \quad (2.29)$$

Кроме того, в гамильтониане (2.28) удобно выразить все переменные в единицах ba_0^2 . Тогда:

$$H = \sum_{k=1}^N (s_k - s_{k+1})^2 \quad (2.30)$$

а переменные s_k можно записать в виде:

$$s_k = \begin{cases} s_k^+ = 1 - \xi_k^+ \\ s_k^- = -(1 - \xi_k^-) \end{cases} \quad (2.31)$$

Здесь ξ_k^\pm - случайные числа, характеризующие разброс узлов решетки-матрицы в окрестности k -го электрона. Заметим, что в пределе $\xi_k^\pm = 0$ данная модель переходит в модель Изинга.

Таким образом, мы перешли от модели, в которой все микроскопические переменные являются регулярными, а сама решетка – случайной, к модели, где решетка является регулярной (с единичным периодом), а микроскопические переменные – случайными. Ниже будет показано, что такой переход позволяет существенно упростить процедуру построения основного состояния и изучения низкотемпературных термодинамических свойств. Метод реплик достаточно универсален, но модели, получающиеся в рамках этого метода слишком

громоздки для аналитического анализа, поэтому для расчета термодинамических функций системы использовался метод трансфер-матриц и метод сшивок.

2.3. Метод трансфер-матриц для решеточного газа

Для исследования основного состояния системы, описываемой гамильтонианом (2.30) предложен оригинальный метод, основанный на введении малого локального магнитного поля в систему. С учетом поля, действующего на узел k_0 , гамильтониан $H = \sum_{k=1}^N \tilde{H}(s_k, s_{k+1})$ приобретает вид

$$\tilde{H}(s_k, s_{k+1}) = (s_k - s_{k+1}) + \delta_{k,k_0} h s_k \quad (2.32)$$

“Намагниченность” одного “спина” можно определить с помощью стандартного термодинамического выражения:

$$M_{k_0} = \frac{\partial F(H, T)}{\partial h} = -T \frac{\partial \ln Z(H, T)}{\partial h} \quad (2.33)$$

Таким образом, найдя статистическую сумму системы можно рассчитать “намагниченность” каждого “спина” системы и, стало быть, в пределе низких температур T и малых полей h определить структуру основного состояния.

Статистическая сумма системы записывается как:

$$Z = \text{Tr} \prod_{j=1}^N \hat{P}_j \quad (2.34)$$

$$\hat{P}_j = \begin{pmatrix} e^{\beta \tilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^+)} & e^{\beta \tilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^-)} \\ e^{\beta \tilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^+)} & e^{\beta \tilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^-)} \end{pmatrix} \quad (2.35)$$

В случае периодических граничных условий (2.29) $\hat{P}_{N+1} = \hat{P}_1$.

Прямое численное перемножение матриц (2.35) сопряжено с трудностями, т.к. в области низких температур матричные элементы становятся либо экспоненциально большими, либо экспоненциально малыми величинами. Для

увеличения точности вычисления матрице \widehat{P}_j в соответствие ставится матрица \widehat{G}_j

$$\widehat{G}_j = \begin{pmatrix} \beta \widetilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^+) & \beta \widetilde{H}(s_j^+, s_{j+1}^-) \\ \beta \widetilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^+) & \beta \widetilde{H}(s_j^-, s_{j+1}^-) \end{pmatrix} \quad (2.36)$$

При перемножении матриц $\widehat{P}_i \widehat{P}_j$ будут возникать выражения типа $\ln(e^a + e^b) = a + \ln(1 + e^{b-a})$. Определим функцию, которая была бы разложением логарифма в ряд Тейлора:

$$F(a, b) = \begin{cases} a + e^{b-a}; & a > b \\ b + e^{a-b}; & b > a \end{cases} \quad (2.37)$$

Введем операцию перемножения матриц \widehat{G}_i :

$$\begin{aligned} \widehat{G}_i \bullet \widehat{G}_j = \\ \begin{pmatrix} F(g_{11}^i + g_{11}^j, g_{12}^i + g_{12}^j) & F(g_{11}^i + g_{12}^j, g_{12}^i + g_{22}^j) \\ F(g_{21}^i + g_{11}^j, g_{22}^i + g_{21}^j) & F(g_{21}^i + g_{12}^j, g_{22}^i + g_{22}^j) \end{pmatrix} \end{aligned} \quad (2.38)$$

символами $g_{11}^i, g_{12}^i, g_{21}^i, g_{22}^i$ обозначаются матричные элементы \widehat{G}_i . Пусть

$$\widetilde{G} = \widehat{G}_1 \bullet \widehat{G}_2 \bullet \dots \bullet \widehat{G}_N \quad (2.39)$$

Введем обратное преобразование

$$\widetilde{P}(G) = \begin{pmatrix} e^{g_{11}} & e^{g_{12}} \\ e^{g_{21}} & e^{g_{22}} \end{pmatrix} \quad (2.40)$$

Тогда

$$\widetilde{Z}_G = \text{Tr} \widetilde{P}(\widetilde{G}) \quad (2.41)$$

В пределе низких температур статистическая сумма, вычисленная при помощи (2.34) с экспоненциальной точностью совпадает с (2.41).

Таким образом, алгоритм вычисления следующий:

- Задается конфигурация ξ_k^\pm
- Строятся матрицы \hat{G}_j (2.36)
- Последовательно перемножаются матрицы $\hat{G}_1 \cdot \hat{G}_2 \cdot \dots \cdot G_N$ по формуле (2.38)
- Затем вычисляется статистическая сумма (2.41)
- Вводится небольшое поле h на первом узле и снова вычисляется статистическая сумма (2.41)
- В конце вычисляется локальная намагниченность по формуле (2.33)

Последовательно осуществляя эту процедуру по всем “спинам”, можно получить ориентацию “спинов” основного состояния системы. Следует отметить, что у данного метода имеется ряд недостатков. Тот факт, что локальное поле действует только на один спин, означает, что намагниченность системы будет стремиться к нулю при увеличении числа узлов как $1/N$. Следовательно, этот метод адекватен только для систем ограниченного размера, в этом случае граничные условия могут влиять на основное состояние. Во вторых амплитуда пробного поля h должна быть мала, так чтобы энергия поля на узле E_{sh} была значительно меньше обменной энергии

$$E_{sh} < E_{sf} \quad (2.42)$$

где E_{sf} - это характерная энергия переворота спина. Однако из-за высокого вырождения основного состояния энергия E_{sf} может быть нулевой либо близкой к нулю. При поиске основного состояния метод позволяет получать одну из возможных его реализаций, а знак пробного поля может повлиять на

выбор этой реализации. Так же метод трансфер-матриц не является точным, т. к. для нахождения основного состояния используется не нулевая температура.

2.4. Специфика основного состояния, численное и аналитическое описание

Основное состояние было получено нами и другим методом, лишенным перечисленных выше недостатков. Основная идея состоит в разбиении системы на множества подсистем, нахождения в каждой подсистеме состояния соответствующего минимуму энергии данной подсистемы и сшивка всех подсистем. Стоит отметить, что при некоторых способах разбиения всей системы последующая сшивка полученных решений становится невозможной в силу несовпадения решений на границах подсистем. В таких случаях необходимо выбрать другой способ разбиения.

Произведем замену:

$$s_k = \frac{s_k^+ + s_k^-}{2} + \sigma_k \frac{s_k^+ - s_k^-}{2}, \quad (2.43)$$

где введены спиновые переменные $\sigma_k = \pm 1$

В результате гамильтониан приобретает вид

$$H = \frac{1}{2} \sum_{k=1}^N J_k \sigma_k \sigma_{k+1} + h_k \sigma_k \quad (2.44)$$

Где параметр обменного взаимодействия и амплитуда внешнего поля являются случайными, но коррелированными между собой.

$$h_k = (s_k^+ - s_k^-)(-s_{k-1}^+ - s_{k-1}^- + 4s_k^+ + 4s_k^- - s_{k+1}^+ - s_{k+1}^-) \quad (2.45)$$

$$J_k = (s_k^+ - s_k^-)(s_{k+1}^+ - s_{k+1}^-) \quad (2.46)$$

Основное состояния такой спиновой системы может быть найдено при разбиении ее на множества подсистем, нахождения такого решения для каждой подсистемы которое соответствовало бы минимуму энергии. Сшивка всех

полученных решений означает, что направление спинов в граничных узлах, которые входят в обе сшиваемые подсистемы одновременно, должны совпадать. Продемонстрировать это можно более детально разбив цепочку на n частей.

Точки, обозначающие номер узла на котором происходит разбиение обозначим как p_m , где $m = 1, \dots, n$, соответственно возможные значения p_m лежат в интервале от 1 до N , причем $p_0 = 1, p_n = N$.

Необходимо обратить внимание на то, что спин с номером p_{m+1} принадлежит как подсистеме m , в качестве последнего спина, так и подсистеме $m+1$ в качестве первого. Количество спинов в m -й подсистеме $l_m = p_{m+1} - p_m + 1$. Индекс j – нумерует спины внутри цепочки и пробегает значения от 1 до l_m .

$$\sigma_{p_m}, \sigma_{p_{m+1}}, \sigma_{p_{m+2}}, \dots, \sigma_{p_{m+j}}, \dots, \sigma_{p_{m+l_m-1}}, \sigma_{p_{m+1}} \quad (2.47)$$

Пусть теперь $\sigma_{p_m}^{min}, \sigma_{p_{m+1}}^{min}, \dots, \sigma_{p_{m+l_m}}^{min}$ значения всех спинов, при которых происходит минимизация энергии в какой либо части цепочки. Если возможно нахождение всех спинов $\sigma_{p_{m+j}}^{min}$, в каждой отдельно взятой подсистеме m , при условии $\sigma_{p_{m+l_m}}^{min} = \sigma_{p_{m+1}}^{min}$, то весь набор спинов $\sigma_1^{min}, \sigma_2^{min}, \dots, \sigma_N^{min}$ отвечает минимуму энергии гамильтониана (2.44).

Таким образом, алгоритм этой процедуры таков:

- Разбиение системы на n частей
- Последовательная минимизация всех l_m спинов каждой m -й части
- Проверка условия сшивки на стыках подсистем $\sigma_{p_{m+l_m}}^{min} = \sigma_{p_{m+1}}^{min}$
- Если условия сшивки не выполнены, повторение алгоритма заново, с разбиением в других узлах.

Основное состояние любой неупорядоченной фрустрированной системы обладает высокой степенью вырождения. Приведенный выше алгоритм

позволяет получать одно из возможных состояний, соответствующих глобальному минимуму энергии. Состояния, полученные при помощи разных способов разбиения, могут быть различными, однако нет гарантий получения всех возможных состояний путем перебора способов разбиения. Мини области, на которые делится система, также могут быть вырожденными.

Выбор оптимального количества подсистем n зависит от мощности ПК. Так как в данной схеме было осуществлено прямое вычисление состояний для каждой дочерней цепочки, то общее время вычислений $t_0 \sim n2^{Ne/n}$, поэтому при количестве частиц $N = 10^4 - 10^5$ разумно выбрать количество дочерних цепочек $n \sim N/10 - N/20$. Увеличение количества подсистем n ведет к уменьшению времени вычисления, однако количество неудачных попыток, при которых условие сшивки не выполняется, увеличивается. Данный метод обладает большой универсальностью и может быть применен к широкому классу одномерных неупорядоченных систем. К преимуществам метода относится и то что минимизация энергии в каждой дочерней цепочке производится абсолютно независимо от остальных, поэтому становится возможным параллельное вычисление(например на разных ядрах компьютера).

Кроме того этот метод можно расширить на произвольное количество взаимодействий с соседями в системе. В этом случае меняются лишь условия сшивки, например для цепочки спинов с ближайшим и со следующим с ближайшим соседом они будут выглядеть следующим образом:

$$\sigma_{p_m+l_m-1}^{min} = \sigma_{p_{m+1}}^{min} \quad (2.48)$$

$$\sigma_{p_m+l_m}^{min} = \sigma_{p_{m+1}+1}^{min}$$

Используя этот метод, изучено основное состояние гамильтониана (2.44).

Нами исследовано основное состояние системы из $N \sim 10000$ частиц. Показано, что в случае беспорядка в позициях узлов решетки-матрицы оно имеет "блочную" (доменную) структуру [4]. Дальний порядок в системе при

этом разрушается. Введем параметр A , характеризующий беспорядок системы. Тогда:

$$s_k = \begin{cases} s_k^+ = I - A\xi_k^+ \\ s_k^- = -(I - A\xi_k^-) \end{cases} \quad (2.49)$$

Здесь $\xi_k^\pm \in [0,1]$ - равномерно распределенные случайные числа. При $A = 0$ система становится полностью упорядоченной и переходит в модель Изинга. В пределе $A = 1$ наблюдается полное разупорядочение в позициях узлов решетки-матрицы и s_k^\pm становятся равномерно распределенными в интервалах $[0,1]$ и $[-1,0]$, соответственно.

Видно, что основное состояние представляет собой набор доменов, спиновых блоков различной длины. Концентрация доменов резко возрастает с увеличением параметра разупорядочения A . Из (2.45) следует, что взаимодействие между спинами ферромагнитное, хотя и случайное. Поэтому в случае случайного поля по величине порядка обмена в соответствии с критерием Ларкина-Имри-Ма основное состояние не будет насыщенным. Однако их теория не дает детального описания основного состояния в нашем случае, кроме утверждения, что оно должно быть неколлинеарным типа “спинового стекла”. С другой стороны численный метод позволил нам получить точный вид основного состояния, которое демонстрирует доменную структуру.

В случае $A \ll 1$ можно оценить средний размер домена. Так как флуктуация энергии на спин $\delta\varepsilon \sim A^2$, энергия создания доменной стенки на узле $\varepsilon_{dom} \sim (s^+ + s^-)^2 \sim 1$, отсюда можно получить неравенство

$$\delta\varepsilon \sqrt{l_{dom}} \approx \varepsilon_{dom} \quad (2.50)$$

Поэтому для длины домена справедливо соотношение:

$$l_{dom} \sim 1/A^4 \quad (2.51)$$

Отсюда концентрация доменов:

$$c_{dom} \sim A^4 \quad (2.52)$$

В частности, как следует из формул (2.51) и (2.52) при $A = 0$ основное состояние представляет собой лишь один “ферромагнитный” домен. При $A \neq 0$ вырождение снимается: энергии доменов, состоящих из спинов, направленных вверх и вниз, становятся различными.

Энергии доменов длины l равны:

$$\varepsilon^+(l) = A^2 \sum_{k=1}^l (\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 \quad (2.53)$$

$$\varepsilon^-(l) = A^2 \sum_{k=1}^l (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2, \quad (2.54)$$

в зависимости от направления спинов. Их разность $\delta\varepsilon(l)$ тогда равна:

$$\delta\varepsilon(l) = A^2 \sum_{k=1}^l ((\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 - (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2) \quad (2.55)$$

и является случайной (флуктуирующей) величиной. Предположим, что домен, составленный из спинов, направленных вверх, энергетически выгоден. В силу случайности $\delta\varepsilon(l)$ при увеличении длины l рано или поздно такой домен неизбежно станет энергетически невыгодным. Следует заметить, что образование домена, составленного из спинов противоположного направления, сопряжено с проигрышем энергии из-за образования доменной стенки. Эта энергия на узле k также является случайной:

$$\varepsilon_{DW} = (S_l^\pm - S_{l+1}^\mp)^2 = (2 - A\xi_l^\pm - A\xi_{l+1}^\mp)^2. \quad (2.56)$$

Если же $\varepsilon^+(l) > \varepsilon^-(l) + \varepsilon_{DW}$, то образуется доменная стенка и, следовательно, начинает формироваться домен, составленный из спинов, направленных вниз. Затем, при некоторой длине домена выполняется неравенство $\varepsilon^-(l) > \varepsilon^+(l) + \varepsilon_{DW}$, вновь образуется доменная стенка и вновь формируется домен, составленный из спинов, направленных вверх. Таким образом, условие образования доменной стенки: $|\delta\varepsilon(l)| > \varepsilon_{DW}$.

При $A \ll 1$ можно оценить среднюю длину домена $\langle l \rangle$. Средняя энергия образования доменной стенки в пределе $A \ll 1$ по порядку величины равна

$$\langle \varepsilon_{DW} \rangle = 4 - 8A\langle \xi \rangle + 4A\langle \xi \rangle^2. \quad (2.57)$$

В нулевом приближении по A :

$$\langle \varepsilon_{DW} \rangle \approx 4. \quad (2.58)$$

Можно получить зависимость $c_{dom}(A)$ аналитически в пределах слабого разупорядочения. В этом случае в выражении (2.55) $l \rightarrow \infty$ функция распределения $\delta\varepsilon(l)$ стремится к нормальному распределению с математическим ожиданием M и дисперсией D . Поскольку слагаемые в (2.55) статистически зависимы то

$$D[\delta\varepsilon(l)] = A^4(lD[\varepsilon_m] + 2(l-1)K[\varepsilon_m, \varepsilon_{m+1}]) \quad (2.59)$$

где коррелятор

$$K[X, Y] = \langle XY \rangle - \langle X \rangle \langle Y \rangle \quad (2.60)$$

Символом $\langle \dots \rangle$ обозначено усреднение по распределению ξ . Тогда:

$$D[\varepsilon_m] = \langle [(\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 - (\xi_m^- - \xi_{m+1}^-)^2]^2 \rangle = 2(d_1 - d_2), \quad (2.61)$$

где

$$d_1 = \langle (\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 \rangle = 2\langle \xi^4 \rangle - 8\langle \xi \rangle \langle \xi^3 \rangle + 6\langle \xi^2 \rangle^2 \quad (2.62)$$

$$d_2 = \langle (\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)(\xi_m^- - \xi_{m+1}^-) \rangle = 2\langle \xi^4 \rangle - 8\langle \xi \rangle \langle \xi^3 \rangle + 6\langle \xi^2 \rangle^2 = 4D^2[\xi]. \quad (2.63)$$

В силу статистической эквивалентности распределений ξ_m^+ и ξ_m^-

$$\langle (\xi_m^+ - \xi_{m+1}^+)^2 - (\xi_m^- - \xi_{m+1}^-)^2 \rangle = 0,$$

$$D[\varepsilon_k] = \frac{7A^4}{90}. \quad (2.64)$$

Коррелятор между ε_k и ε_{k+1} вычисляется по формуле:

$$K[\varepsilon_k, \varepsilon_{k+1}] = \langle [(\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 - (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2][(\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+)^2 - (\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-)^2] \rangle. \quad (2.65)$$

Ее можно представить в более простом виде, введя обозначения K_1 и K_2 :

$$K[\varepsilon_k, \varepsilon_{k+1}] = 2(K_1 - K_2), \quad (2.66)$$

$$\text{где } K_1 = \langle (\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 (\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+)^2 \rangle = \langle (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2 (\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-)^2 \rangle,$$

$$\text{а } K_2 = \langle (\xi_k^+ - \xi_{k+1}^+)^2 (\xi_{k+1}^- - \xi_{k+2}^-)^2 \rangle = \langle (\xi_k^- - \xi_{k+1}^-)^2 (\xi_{k+1}^+ - \xi_{k+2}^+)^2 \rangle.$$

Рассматривался случай равномерного распределения на интервале (0;1].

Отсюда видно, что

$$d_1 = \frac{1}{30}$$

$$d_2 = \frac{1}{36}$$

$$K_1 = 3\langle \xi^2 \rangle^2 + \langle \xi^4 \rangle - 4\langle \xi^3 \rangle \langle \xi \rangle = \frac{1}{30}, \quad (2.67)$$

$$K_2 = \frac{1}{36}. \quad (2.68)$$

Следовательно, коррелятор равен:

$$K[\varepsilon_k, \varepsilon_{k+1}] = 2(K_1 - K_2) = \frac{1}{90}. \quad (2.69)$$

Дисперсия -

$$D[\varepsilon_m] = 2(d_1 - d_2) = \frac{7}{90}. \quad (2.70)$$

Зная коррелятор между случайными величинами ε_k и ε_{k+1} и дисперсию случайной величины $D[\varepsilon_k]$, мы вычисляем среднюю дисперсию, приходящуюся на один узел. Физический смысл этой величины – среднее квадрата флуктуации энергии на одном узле:

$$\langle \varepsilon^2 \rangle = D = \lim_{N \rightarrow \infty} \frac{D[\sum_k \varepsilon_k]}{N} = \frac{A^4}{10}. \quad (2.71)$$

Дисперсия суммы $D[\sum_k \varepsilon_k]$, рассчитанная численно, полностью совпадает с полученным аналитически значением. Плотность вероятности для функции распределения $\delta\varepsilon(l)$ приобретает вид

$$f(\delta\varepsilon(l)) = \frac{1}{\sqrt{2\pi D l}} e^{-\frac{(\delta\varepsilon(l))^2}{2D}}. \quad (2.72)$$

Для вычисления средней длины доменов необходимо вычислить совместную функцию распределения по длинам l и энергиям $\delta\varepsilon(l)$. Получить аналитическое выражение для такой функции распределения можно в пределе $A \ll 1$. Обратим

внимание на то, что слагаемые в (2.55) ограничены сверху, а энергии образования доменных стенок ограничены снизу, согласно:

$$\varepsilon_{DW_{min}} = 4(1 - A)^2. \quad (2.73)$$

Из условия образования доменной стенки следует ограничение снизу на число слагаемых

$$\varepsilon_{DW_{min}} < \varepsilon_{DW} < \delta\varepsilon(l) < A^2 \sum_{k=1}^l |s_k| < A^2 l. \quad (2.74)$$

Следовательно,

$$l \geq l_0 \sim \frac{\varepsilon_{DW_{min}}}{A^2} = \frac{4(1-A)^2}{A^2} \quad (2.75)$$

Таким образом при $l < l_0$ вероятность образования доменной стенки равна нулю. Иными словами существует минимальная длина доменной стенки $\sim l_0$. В пределе $A \ll 1$, $l_0 \rightarrow \infty$, это означает, что распределение $\delta\varepsilon(l)$ можно считать нормальным.

Найдем распределение длин доменов при фиксированной энергии образования доменных стенок ε_{DW} (так называемое уловное распределение). При $l > l_0 \gg 1$ длину доменов можно считать непрерывной переменной. Вероятность образования домена длиной l равна:

$$P\{|\delta\varepsilon(l)| \geq \delta\varepsilon(l)\} = 1 - \Phi\{|\delta\varepsilon(l)| < \delta\varepsilon(l)\}. \quad (2.76)$$

Здесь Φ - распределение модуля нормально распределенной величины (полунормальное распределение). Переход от полунормального распределения к нормальному в данном случае возможен, поскольку $M(\delta\varepsilon(l)) = 0$. Запишем:

$$\begin{aligned} \Phi\{|\delta\varepsilon(l)| < \delta\varepsilon(l)\} &= \sqrt{\frac{2}{\pi D l}} \int_0^{\varepsilon_{DW}} e^{-\frac{y^2}{2Dl}} dy = \left[y^2 = \frac{l\varepsilon_{DW}^2}{x} \right] = \\ &= \frac{\varepsilon_{DW}}{\sqrt{2\pi D}} \int_l^\infty \frac{1}{x^3} e^{-\frac{\varepsilon_{DW}^2}{2Dx}} dx = 1 - G(\varepsilon_{DW}, l), \end{aligned} \quad (2.77)$$

где

$$G(\varepsilon_{DW}, l) = \frac{\varepsilon_{DW}}{\sqrt{2\pi D}} \int_0^l \frac{1}{x^3} e^{-\frac{\varepsilon_{DW}^2}{2Dx}} dx = \int_0^l g(\varepsilon_{DW}, x) dx \quad - \quad (2.78)$$

распределение Леви, которое представляет собой устойчивое распределение с т.н. “тяжелым хвостом”. Напомним, что в данном случае ε_{DW} является параметром распределения.

$$P\{|\delta\varepsilon(l)| \geq \delta\varepsilon(l)\} = G(\varepsilon_{DW}, l) \quad (2.79)$$

Для того чтобы найти распределение доменов по длинам, необходимо усреднить это выражение по распределению доменных стенок:

$$w(l) = \int_0^\infty g(\varepsilon, l)\rho(\varepsilon)d\varepsilon. \quad (2.80)$$

Согласно (2.55), в пределе $A \ll 1$ функция $\rho(\varepsilon)$ представляет собой распределение суммы двух независимых равномерно распределенных случайных чисел, т.е. треугольное распределение Симпсона.

$$\rho(\varepsilon) = \frac{4}{(\varepsilon_{DW}^{max} - \varepsilon_{DW}^{min})^2} \begin{cases} \varepsilon_{DW}^{max} - \varepsilon & \varepsilon \in (\varepsilon_{DW}^{min}, \varepsilon_{DW}^{mid}) \\ \varepsilon - \varepsilon_{DW}^{min} & \varepsilon \in [\varepsilon_{DW}^{mid}, \varepsilon_{DW}^{max}) \\ 0 & \text{в других случаях} \end{cases} \quad (2.81)$$

Здесь

$$\varepsilon_{DW}^{max} = 4, \varepsilon_{DW}^{min} = \varepsilon_{DW}^{max}(1 - A^2), \varepsilon_{DW}^{mid} = \frac{\varepsilon_{DW}^{max} - \varepsilon_{DW}^{min}}{2} \quad (2.82)$$

получаем

$$w(l) \approx \frac{\varepsilon_{DW}^{mid}}{\sqrt{2\pi D}} \frac{1}{l^3} e^{-\frac{\varepsilon_{DW}^{mid^2}}{2Dl}} \quad (2.83)$$

Как было указано выше, данное выражение справедливо лишь при $l > l_0$, но при интегрировании по (2.83) основной вклад дают области $l \ll 1$, что типично для распределений с «тяжелым хвостом». Выбор нижнего предела в большой степени является произвольным. Более того, проведенное численное моделирование показало, что распределение (2.83) хорошо описывает вероятность образования доменных стенок во всем диапазоне l . Нижний предел интегрирования по (2.83) можно положить равным нулю. Среднее по распределению отсутствует, в то же время среднее гармоническое конечно.

$$\bar{l} = \langle \frac{1}{l} \rangle^{-1} = \frac{\varepsilon_{DW}^{mid^2}}{3D}. \quad (2.84)$$

Определим концентрацию доменов следующим образом:

$$c_{dom} = \frac{2}{\bar{l}_{+1}} . \quad (2.85)$$

Здесь предполагается, что минимальная длина домена $\bar{l} = 1$, ширина доменной стенки, очевидно, равна единице. Максимальное значение концентрации $c_{dom} = 1$,

$$c_{dom} = \frac{2}{\bar{l}_{+1}} \approx \frac{3A^4}{80} [1 + 2A] . \quad (2.86)$$

Полученное выражение можно сравнить с аппроксимацией численным счетом. Для этого ограничимся первым слагаемым в квадратных скобках. Тогда

$$c_{dom} = \frac{3A^4}{80} . \quad (2.87)$$

Из формулы

$$c_{dom} = (A/A_0)^d \quad (2.88)$$

получены аналитически значения параметров A_0 и d :

$$A_0 = \sqrt[4]{\frac{10 \cdot 8}{3}} \approx 2.27 \quad (2.89)$$

$$d = 4.$$

Мы рассчитали концентрацию доменов, в зависимости от параметра A . Результаты представлены на рис. 2.2. Результаты аппроксимировались функцией $c_{dom} = (A/A_0)^d$, наилучшее совпадение найдено для $A_0 = 1.78885$ и $d = 4.0603$ Численный расчет хорошо совпадает с оценочными вычислениями.

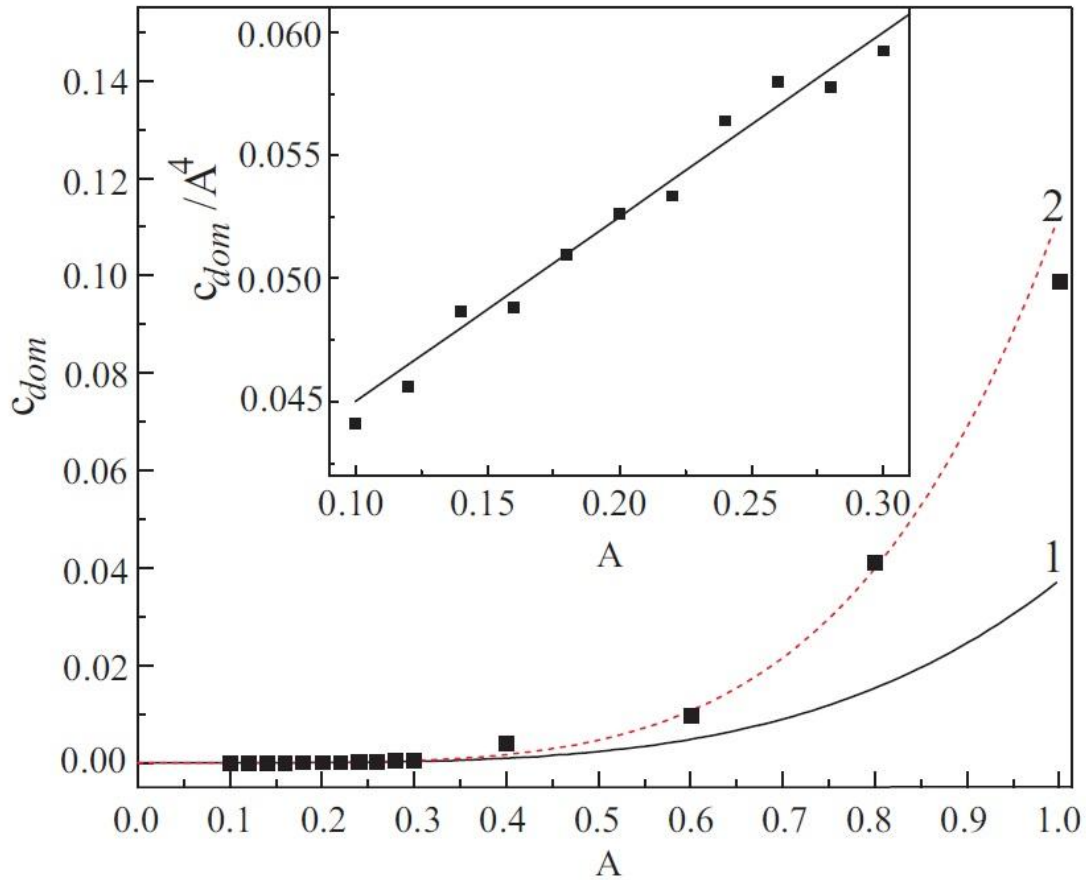


Рис. 2.2 Зависимость концентрации доменов, как функции от параметра разупорядочения A . Заполненные символы – результаты нашего вычисления. Кривая - аппроксимация функцией $c_{dom} = (A/A_0)^d$. На вставке видно линейную зависимость c_{dom}/A^4 от параметра A в области малых разупорядочений.

Некоторые примеры структур основного состояния приведены на рис. 2.3.

На основе полученных результатов было численно смоделировано внешнее поле h_k , структура которого повторяет структуру доменов основного состояния.

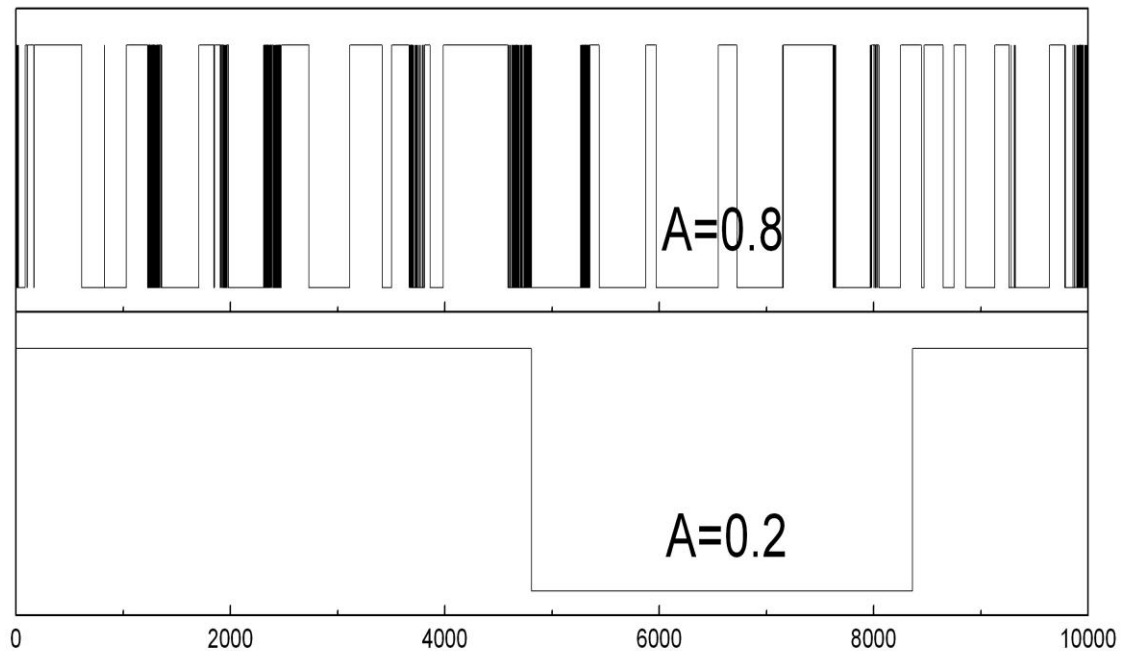


Рис. 2.3 Примеры структур основного состояния при различных величинах разупорядочения решетки-матрицы (A).

Иными словами, если в основном состоянии k -й “спин” принимает значение s_k^+ , то поле на этом узле равно h_0 ($h_0 \ll 1$), в противоположном случае поле равно $-h_0$. В данное поле вводилась добавка, случайным образом смещающая положения доменных стенок – узлов на который поле h_k меняет знак (точнее узлов, на которых выполняется неравенство $h_k \neq h_{k+1}$). При помощи параметра B можно было варьировать среднюю амплитуду смещений доменных стенок. Построен график зависимости намагниченности от параметра B (рис. 2.4). В отсутствие флуктуаций ($B=0$, внешнее поле h_k повторяет структуру основного состояния) намагниченность системы максимальна. Затем наблюдается полочка, обусловленная тем, что амплитуда флуктуаций меньше периода решетки-матрицы (в безразмерных единицах этот период равен 1).

Далее, с ростом B намагниченность падает линейно в достаточно широком диапазоне. Линейная зависимость является следствием как малости амплитуды поля h_0 , так и малости B (в сравнении со средней длиной домена l_{dom}). В этом случае “спины”, чья ориентация в основном состоянии противоположна направлению поля, дают отрицательный вклад в намагниченность. Количество же таких “спинов” пропорционально B .

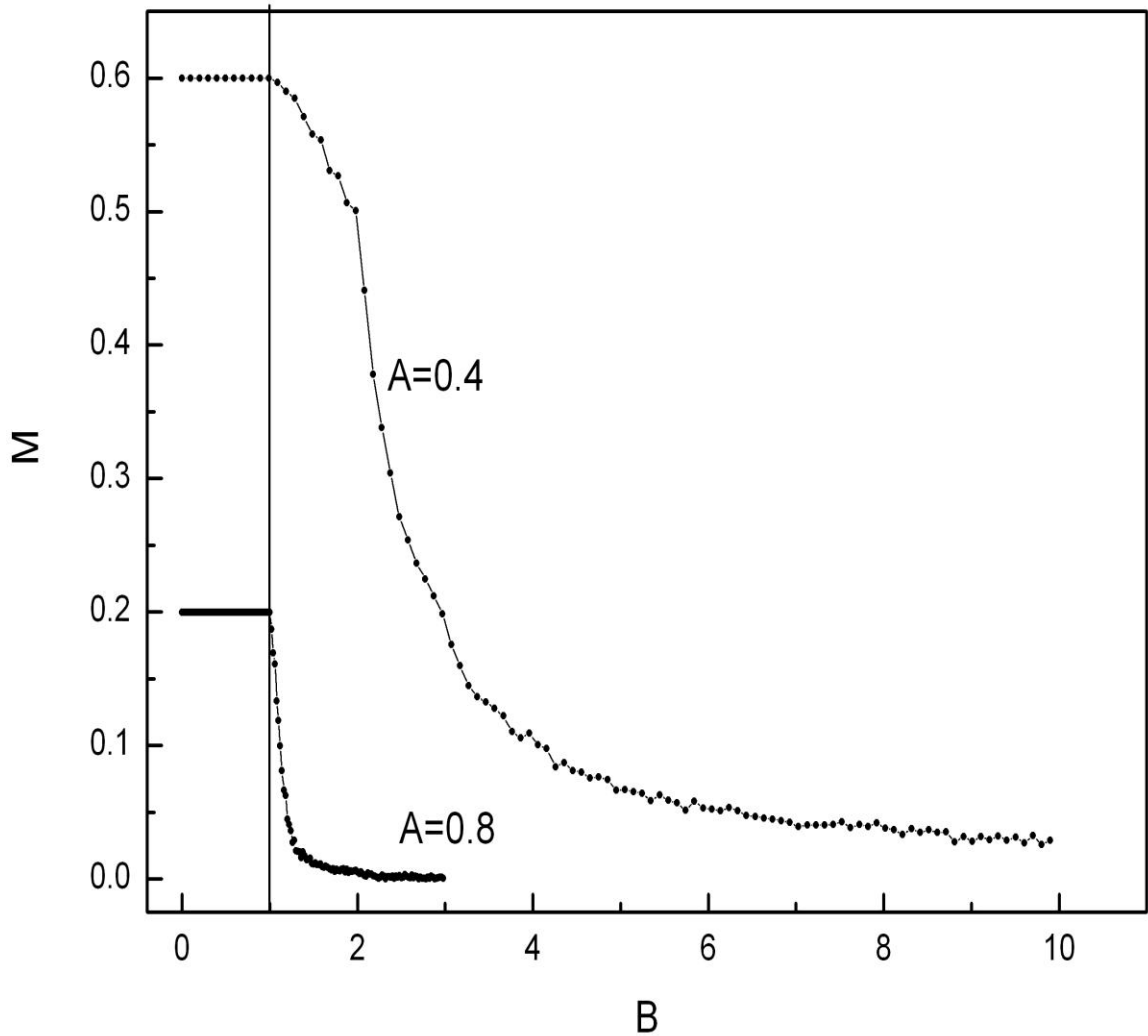


Рис. 2.4 Зависимость намагниченности (M) от величины флуктуаций (B) внешнего поля h_k . $B = 0$ соответствует случаю, когда симметрия внешнего поля совпадает с симметрией основного состояния.

Выводы

Изучено основное состояние взаимодействующих частиц на одномерной решетке - матрице с использованием нового численного метода. Показано, что если концентрация частиц достаточно мала, то достаточно малое разупорядочение в позициях узлов решетки-матрицы приводит к формированию “доменов” из частиц и разрушает дальний порядок, свойственный вигнеровскому кристаллу при отсутствии разупорядочения. Природа доменов может быть объяснена при помощи формулы Хаббарда [53] для описания позиций в вигнеровском кристалле. В случае трансляционно-инвариантной решетки в формуле есть произвольная константа.

Изучено также влияние разупорядочения на структуру основного состояния одномерного решеточного газа с отталкивающим потенциалом на неупорядоченной решетке-матрице. Показано, что в пределе низкой концентрации частиц данная система эквивалентна одномерной спиновой цепочке со случайными значениями спинов. При помощи численного моделирования было показано, что сколь угодно слабое разупорядочение приводит к разрушению дальнего порядка в системе, т.е. основное состояние такой спиновой цепочки представляет собой набор чередующихся ферромагнитных доменов случайной длины. Впервые были получены аналитические зависимости, связывающие характерные размеры доменов с параметром разупорядочения.

Таким образом, к кратким выводам этого раздела можно отнести следующие:

1. Показано, как происходит разрушение трансляционной симметрии электронного газа на неупорядоченной решетке-матрице.

2. Показано также, что в случае низкой концентрации частиц основное состояние имеет пространственную структуру, которая эквивалентна структуре различных ферромагнитных доменов, которые случайно чередуются.
3. Кроме того, установлена аналитическая функция среднего линейного размера домена в зависимости от степени неупорядоченности.

РАЗДЕЛ 3

ЭЛЕКТРОННЫЙ КРИСТАЛ НАД ПОВЕРХНОСТЬЮ ЖИДКОГО ГЕЛИЯ. ДВУМЕРНЫЕ ФРУСТРИРОВАННЫЕ СИСТЕМЫ

Одной из интересных геометрически фрустрированных систем является модель Изинга на треугольной решетке с антиферромагнитным взаимодействием. Примечательно, что элементарной ячейкой такой решетки является плакет, представляющий собой простейший пример геометрической фрустрации.

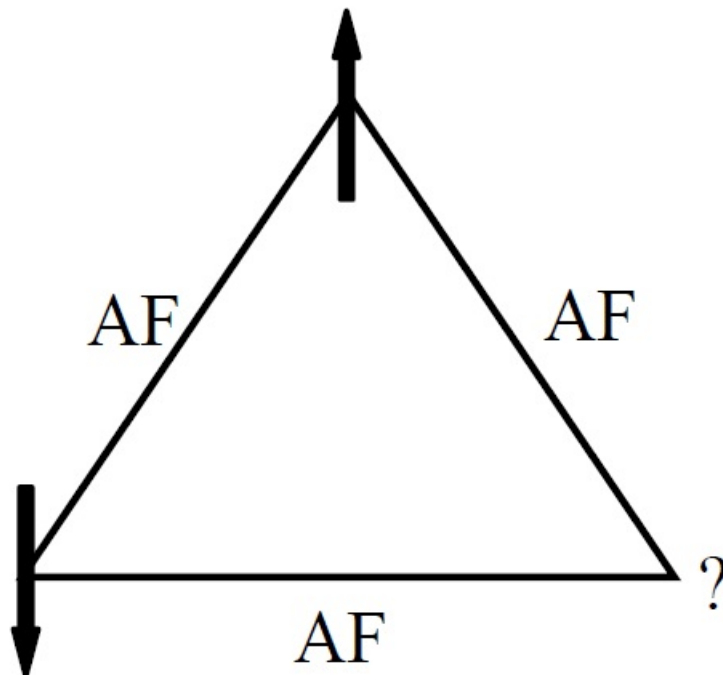


Рис. 3.1 *Треугольный плакет с антиферромагнитным взаимодействием ближайших соседей. Здесь имеет место лишь геометрическая фрустрация. Одно из взаимодействий не может быть удовлетворено, в независимости от направлений других спинов.*

Треугольную решетку также образуют электроны в вигнеровском кристалле (ВК) над поверхностью жидкого гелия. Такое упорядочение

происходит вследствие центральной симметрии сил Кулона [65-69]. Как известно, кристаллизация становится возможной, если потенциальная энергия кулоновского взаимодействия электронов превосходит их кинетическую энергию. Критерием этого условия [65] является выполнение неравенства $\Gamma = e^2(\pi n_s)^{1/2} / T > 137$, где Γ — так называемый фундаментальный параметр, e — заряд электрона, n_e — концентрация электронов в ВК, а T — температура.

Двумерные электронные системы над поверхностью жидкого гелия представляют собой интересные объекты благодаря ряду весьма необычных свойств. На сегодняшний день существует большое количество экспериментальных и теоретических работ, посвященных свойствам ВК. Хорошо известно, что данное электронное состояние устойчиво при прижимающих электрических полях E , превышающих поле полной экранировки заряда ВК [65]:

$$E \geq E_0 = 2\pi e n_e. \quad (3.1)$$

В недавно опубликованной статье [72] изучались электрические свойства системы электронов при возбуждении слабым переменным электромагнитным полем в прижимающих полях, близких к E_0 . Было обнаружено, что при сбросе прижимающего поля амплитуда и фаза детектируемого сигнала изменяются скачкообразно.

3.1. Описание двумерной системы электронов в рамках многочастичной фрустрированной модели

Рассмотрим гамильтониан для системы электронов над поверхностью гелия.

$$H = \frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} - e^2 \eta \sum_i \frac{1}{z_i} - eE \sum_i z_i \quad (3.2)$$

Первое слагаемое представляет собой кулоновскую энергию

взаимодействия электронов между собой. Второе слагаемое – энергия притяжения заряда к своему изображению в гелии. И третье – энергия взаимодействия электронов с полем E . Координаты электронов можно записать в виде векторной суммы радиус вектора в плоскости ВК и перпендикулярно ей.

В дальнейшем нам понадобится такая величина как кулоновская энергия в расчете на частицу $U_1(\vec{R}_i)$

$$U_1(\vec{R}_i) = \sum_j \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|}, \quad j \neq i \quad (3.3)$$

Эта величина, просуммированная по всем электронам, дает величину кулоновской энергии всей системы

$$\frac{e^2}{2} \sum_{i \neq j} \frac{1}{|\vec{R}_i - \vec{R}_j|} = \sum_i U_1(\vec{R}_i) \quad (3.4)$$

Координаты электронов можно записать как

$$\vec{R}_i = \vec{r}_i + z_i \vec{e}_z \quad (3.5)$$

$$\vec{r}_i = \vec{r}(x, y) \quad (3.6)$$

Потенциал взаимодействия электрона с гелием имеет вид:

$$V_0 \theta(-z_i) - \frac{e^2 \eta}{z_i} = U_2(z_i), \quad (3.7)$$

где введен символ

$$\eta = \frac{(\varepsilon - 1)}{4(\varepsilon + 1)}, \quad (3.8)$$

здесь ε - диэлектрическая проницаемость гелия, V_0 - энергия проникновения электрона в гелий.

Поскольку рассматривается случай не слишком больших прижимающих электрических полей, можно считать величину V_0 бесконечно большой. Как известно электроны над поверхностью жидкого гелия находятся в потенциальной яме [65]. Уровни энергии внутри ямы квантуются, и основному

состоянию соответствует среднее расстояние до поверхности гелия $\langle z \rangle_1 \sim 114 \text{ \AA}$, а первому возбужденному $\langle z \rangle_2 \sim 456 \text{ \AA}$.

Потенциал взаимодействия электрона с внешним электрическим полем U_3 выбран таким образом, что $U_3(\langle z \rangle_1) = 0$.

$$U_3(z) = eE(z - \langle z \rangle_1). \quad (3.9)$$

Удобно ввести обозначения:

$$z_{ij} = z_i - z_j, \quad (3.10)$$

$$r_{ij}^2 = (x_i - x_j)^2 + (y_i - y_j)^2. \quad (3.11)$$

Имея ввиду, что $r_{ij} \gg z_{ij}$, приходим к приближенному гамильтониану:

$$H = -\frac{e^2}{4} \sum_{i \neq j} \frac{z_{ij}^2}{r_{ij}^3} - eE \sum_i z_i - e^2 \eta \sum_i \frac{1}{z_i}. \quad (3.12)$$

Рассмотрев в качестве модели возможность возбуждения электронов лишь на первый возбужденный уровень можно свести описание такой системы к модели Изинга на треугольной решетке с дальнодействием. Причем взаимодействие между частицами происходит по закону Кулона. Разумеется, в реальном кристалле возбуждение какого либо электрона сопрягается с искажением треугольной решетки, однако в качестве модели будем считать искажение не существенным, что означает неизменность координат спинов в пространстве.

Переменные Изинга можно ввести следующим образом:

$$z_i = \sigma_i \frac{\Delta}{2} + \langle z \rangle_1 + \frac{\Delta}{2}, \quad (3.13)$$

$$\frac{1}{z_i} = -\sigma_i \frac{\Delta}{2\langle z \rangle_1 \langle z \rangle_2} + \frac{1}{2} \left(\frac{1}{\langle z \rangle_1} + \frac{1}{\langle z \rangle_2} \right), \quad (3.14)$$

где $\Delta = \langle z \rangle_2 - \langle z \rangle_1$ – расстояние между основным и первым возбужденным уровнем.

Приходим к гамильтониану:

$$H = \frac{e^2 \Delta^2}{8a_0^3} \sum_{i \neq j} \frac{\sigma_i \sigma_j}{\rho_{ij}^3} - \frac{1}{2} \left(eE \Delta + \frac{e^2 \eta \Delta}{\langle z \rangle_1 \langle z \rangle_2} \right) \sum_i \sigma_i. \quad (3.15)$$

Здесь $\rho_{ij} = \frac{r_{ij}}{a_0}$ - безразмерное расстояние.

Таким образом, изучаемая система свелась к модели Изинга на треугольной решетке с обменом:

$$J_{ij} = \frac{e^2 \Delta^2}{8a_0^3 \rho_{ij}^3} \quad (3.16)$$

и внешним полем:

$$h = \frac{1}{2} (eE\Delta + \frac{e^2 \eta \Delta}{\langle z \rangle_1 \langle z \rangle_2}). \quad (3.17)$$

Поле полной компенсации заряда вигнеровского кристалла $E = 2\pi e n_e$. Таким образом, из соображений экранировки заряда следует, что для того, чтобы в исследуемой системе находились электроны на первом возбужденном уровне, необходимо приложить поле:

$$h_{cr} > \frac{e^2 \Delta}{2} (2\pi n_e + \frac{\eta}{\langle z \rangle_1 \langle z \rangle_2}). \quad (3.18)$$

Было проведено моделирование методом Монте-Карло, чтобы проверить это предположение. Изучалась система из 2500 частиц, расположенных внутри круга. Численно находилось значение поля, ниже которого основное состояние не является однодоменным, т. е. один или несколько спинов антипараллельны полю. Результаты такого расчета приведены на рис 3.2. Было удобно рассчитывать величину $h_{cr} a_0$, изменяя расстояние между частицами. При моделировании мы полагали заряд электрона $e = 1$.

Как видно, результаты хорошо аппроксимируются прямой линией с наклоном

$$h_{cr} a_0 = c \frac{\Delta}{a_0}. \quad (3.19)$$

Наилучшее совпадение происходит при

$$c = 0.2. \quad (3.20)$$

Отсюда получаем:

$$h_{cr} = \frac{2c\Delta n_e}{\sqrt{3}} < \frac{\Delta}{2} \left(2\pi n_e + \frac{\eta}{\langle z \rangle_1 \langle z \rangle_2} \right). \quad (3.21)$$

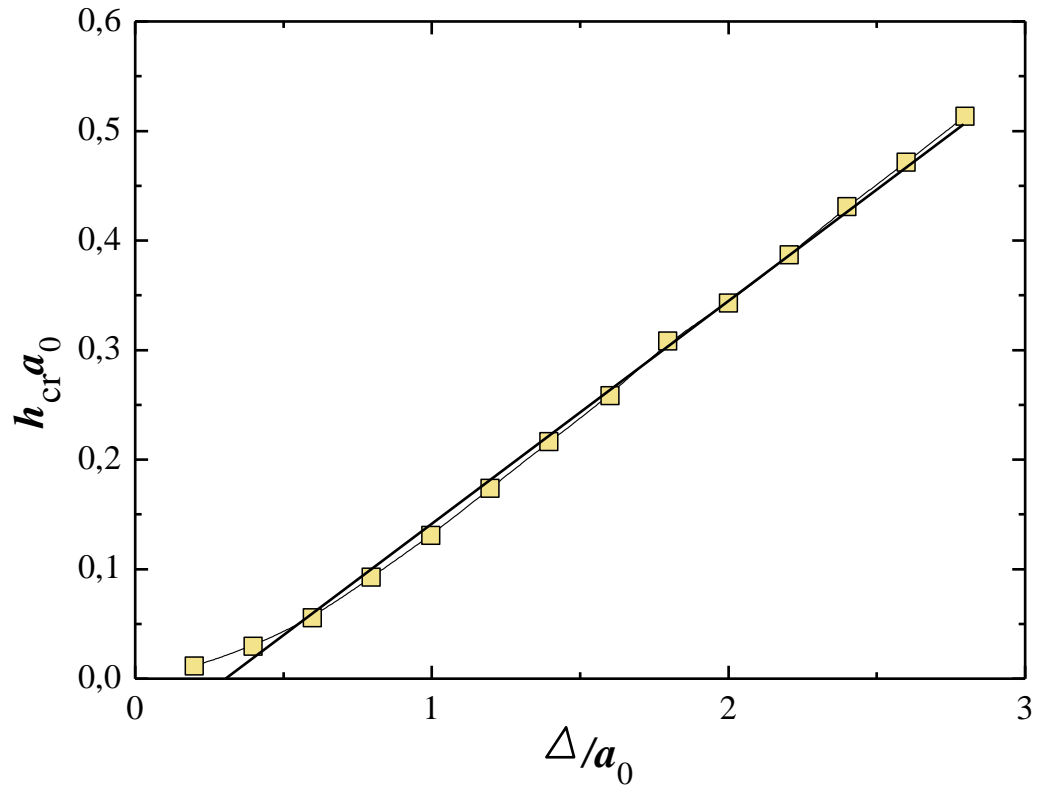


Рис 3.2 Зависимость величины $h_{cr} a_0$ от обратного расстояния между частицами, нормированного на расстояние между уровнями $\frac{\Delta}{a_0}$. Видно, что критическое поле h_{cr} растет линейно с концентрацией $n_e \sim \frac{1}{a_0^2}$.

Оказывается, что в системе из $N=2500$ частиц электронам выгодно переходить на возбужденные урени при гораздо меньшем поле, чем поле полной компенсации. Следует отметить, что изучаемая система является

кулоновской и найденное значение зависит от размера системы. Например, если взять систему всего из двух частиц, расположенных достаточно близко в плоскости ВК, то одной из частиц будет выгодно отдалиться от другой за счет перехода на более высокий уровень. Очевидно, критическое поле растет при увеличении размера системы, см. рис.3.3, а численное исследование существенно затрудняется при большом количестве частиц.

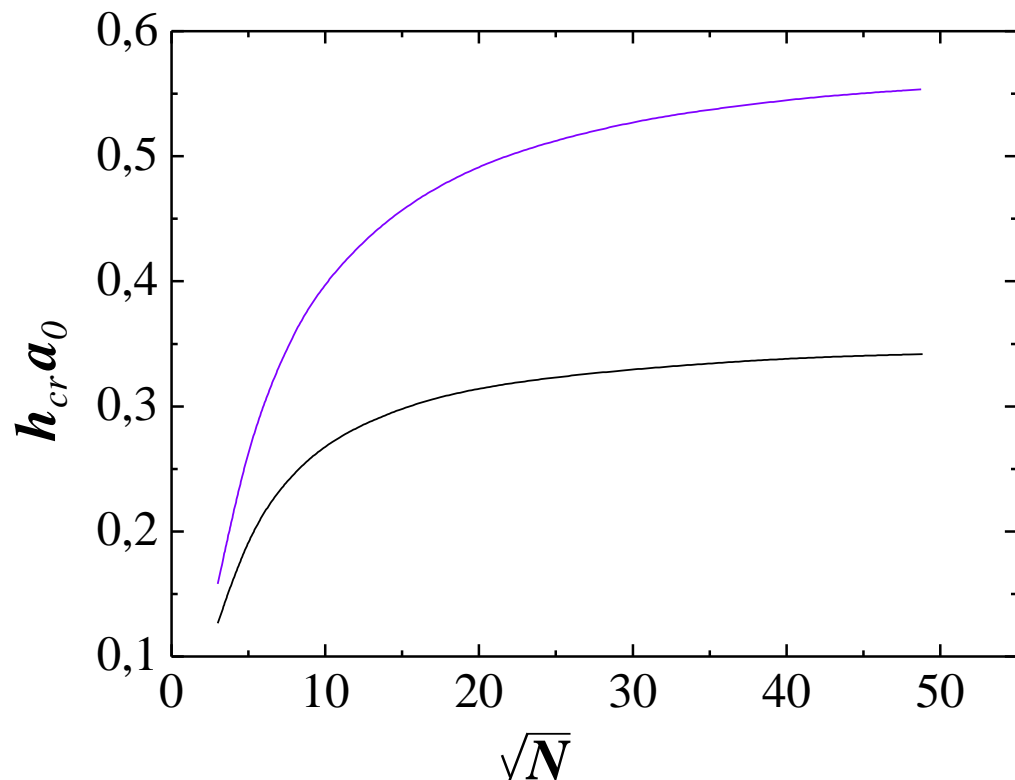


Рис 3.3 Зависимости критического поля от \sqrt{N} для $\frac{\Delta}{a_0} = 2$ (верхняя кривая) и $\frac{\Delta}{a_0} = 3$ (нижняя кривая).

Исходя из этого, есть смысл рассмотреть разрушение ВК на примере одночастичной модели, в которой бесконечное число электронов заполняют

плоскость ВК.

Ниже предложена одночастичная модель, описывающая поведение ВК при переходе через E_0 .

3.2. Устойчивость электронного кристалла

В приближении среднего поля потенциальная энергия состоит из трех частей и может быть записана в виде:

$$U = U_1 + U_2 + U_3 \quad (3.22)$$

Здесь U_1 - потенциал кулоновского взаимодействия электрона, находящегося на расстоянии z от плоскости вигнеровского кристалла, со всеми соседями, U_2 - потенциал взаимодействия электрона с гелием, а U_3 - потенциал взаимодействия электрона с внешним электрическим полем.

Пронумеруем все электроны индексом i . Пусть электрон с номером 0 имеет координаты $(0,0,z)$. Координаты остальных электронов - $(x_i, y_i, 0)$. Тогда потенциал U_1 можно записать в виде:

$$U_1 = \sum_{i \neq 0} \frac{e^2}{\sqrt{x_i^2 + y_i^2 + z^2}} \quad (3.23)$$

Здесь e - заряд электрона. Удобно перейти к безразмерным координатам, введя период решетки вигнеровского кристалла a_0 . Поскольку площадь элементарной ячейки для гексагональной решетки равна $S_0 = \frac{\sqrt{3}}{2} a_0^2$, то электронная плотность n_e выражается через a_0 следующим образом:

$$a_0 = \sqrt{\frac{2}{\sqrt{3}n_e}} \quad (3.24)$$

где n_e — концентрация электронов. Перейдя к безразмерной переменной $r = z/a_0$, получаем выражение для потенциала:

$$U_1(r) = \frac{e^2}{a_0} \sum_{i \neq 0} \frac{1}{\sqrt{r^2 + \rho_i^2}}, \quad (3.25)$$

где $\rho_i = (x_i^2 + y_i^2)/a_0^2$.

В континуальном пределе ($r \gg 1$) сумму можно заменить интегралом. В этом случае:

$$U_1(r) = U_0 - \frac{2\pi e^2 A}{a_0} \sqrt{\alpha^2 + r^2} \quad (3.26)$$

где U_0 , A и α — константы. При $r \gg \alpha$ получаем:

$$U_1(r) = U_0 - \frac{2\pi e^2 A}{a_0} r \quad (3.27)$$

С другой стороны, в данном пределе должно получиться выражение для потенциала бесконечной однородно заряженной пластины:

$$U_1(r) = U_0 - 2\pi e^2 a_0 n_e r. \quad (3.28)$$

Подставляя сюда выражение для n_e из (3.23), находим значение параметра A :

$$A = \frac{2}{\sqrt{3}}. \quad (3.29)$$

Поскольку потенциал определен с точностью до константы, удобно записать U_1 в виде:

$$U_1(r) = \frac{4\pi e^2}{\sqrt{3}a_0} (\alpha - \sqrt{\alpha^2 + r^2}), \quad \alpha > 0 \quad (3.30)$$

так, что $U_1(0) = 0$.

Зависимость U_1 в интервале $0 \leq r \leq l_{max} = 5a_0$ была получена численно. Для этого моделировался фрагмент вигнеровского кристалла, содержащий 5000×5000 частиц. Погрешность вычисления при таких размерах не превышает 0,05%. В центральной части данного фрагмента выделялась окружность с радиусом $100 a_0$. Предполагалось, что частицы, находящиеся вне окружности,

неподвижны. Частицы, находящиеся внутри окружности, могли смещаться случайным образом в только плоскости вигнеровского кристалла (xu - плоскости). Предполагалось, что частица, находящаяся в центре окружности неподвижна и имеет координаты $(0,0,d)$. Далее запускался процесс простейшего Монте-Карло моделирования при температуре $T=0.01U_{cl}$, где $U_{cl} = \frac{e^2}{a_0 k_B}$ - кулоновская энергия на частицу, k_B - постоянная Больцмана. Хотелось бы отметить, что наличие неподвижных "берегов" за пределами указанной окружности обеспечивает устойчивость системы при Монте-Карло моделировании. Результат вычислений представлен на Рис.3.4. Как видно, при $r \gtrsim 10^{-3} a_0$ квадратичный ход сменяется линейным с тангенсом угла наклона $4\pi\sqrt{3}$ что соответствует потенциалу бесконечной однородно заряженной пластины. Энергия отображена в единицах e^2/a_0 . На этом же рисунке сплошной линией представлена аппроксимация данного потенциала функцией (3.30). Наилучший результат получается при $\alpha = 0,6$. Погрешность при этом составляет 0,16%.

Заметим, что в рамках модели, не учитывающей перестройку позиций электронов в плоскости xu при изменении r , получается аналогичная зависимость, но отклонения от квадратичной зависимости появляются при $r \gtrsim 10^{-1} a_0$.

Хотелось бы отметить, что энергия ухода электрона на бесконечность (энергия образования вакансии), получаемая из выражения (3.30), равна:

$$\frac{e^2 \cdot 4\pi\alpha}{a_0 \cdot \sqrt{3}} \approx \frac{e^2}{a_0} 4,3 \quad , \quad (3.31)$$

что достаточно хорошо согласуется со значением, приведенным в работе [71] ($4.21 \cdot e^2/a_0$).

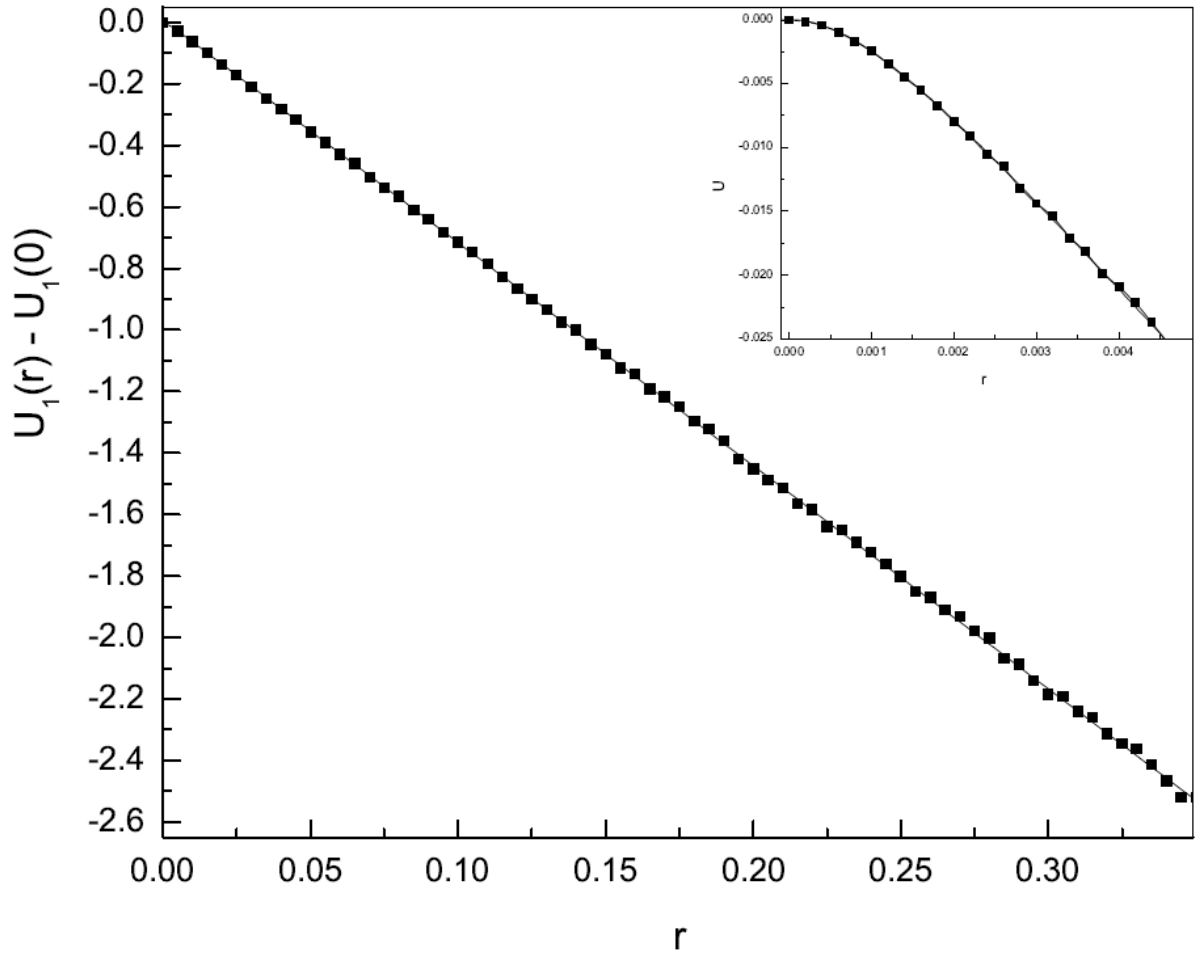


Рис. 3.4 Зависимость кулоновской энергии взаимодействия электрона с вигнеровским кристаллом от рассеяния. Заштрихованные квадраты – результат Монте-Карло моделирования, сплошная линия – аппроксимация функцией (3.30). На вставке представлен фрагмент данной зависимости в области $0 < r < 0,005$.

Записав U_2 через r , получаем:

$$U_2(r) = V_0 \theta(-r) - \frac{e^2 \eta}{a_0 r} . \quad (3.32)$$

Потенциал взаимодействия электрона с внешним электрическим полем U_3 выбран таким образом, что $U_3(r_1) = 0$, где $r_1 = \langle z \rangle_1 / a_0$, напомним $\langle z \rangle_1 \sim 114 \text{ \AA}$.

$$U_3(r) = \frac{e^2}{a_0} E (r - r_1) . \quad (3.33)$$

Введем эффективное прижимающее поле:

$$\tilde{E} = \frac{\sqrt{3}}{4\pi} E \quad . \quad (3.34)$$

Тогда условием экранировки вигнеровского кристалла будет $\tilde{E} = 1$.

$$U_3(r) = \frac{e^2 4\pi}{a_0 \sqrt{3}} \tilde{E} (r - r_1) \quad (3.35)$$

Поскольку электронный кристалл находится на расстоянии r_1 от поверхности гелия, в формуле (3.30) необходимо заменить r на $r - r_1$. Объединяя (3.30), (3.32) и (3.35), получаем выражение для потенциала системы (3.2):

$$U(\tilde{E}, r) = V_0 \theta(-r) + \frac{e^2}{a_0} f(\tilde{E}, r) \quad , \quad (3.36)$$

где введена безразмерная функция:

$$f(\tilde{E}, r) = -\frac{\eta}{r} + \frac{4\pi}{\sqrt{3}} [\tilde{E}(r - r_1) + \alpha - \sqrt{\alpha^2 + (r - r_1)^2}] \quad . \quad (3.37)$$

Вид потенциала (3.36) при различных значениях прижимающего поля \tilde{E} приведен на рис. 3.5. Как видно на рис. 3.5, при $\tilde{E} < 1$ потенциал имеет максимум в точке r_{ext} , положение которого зависит от \tilde{E} , $r_{\text{ext}} = r_{\text{ext}}(\tilde{E})$ и определяется из условия:

$$\frac{df(\tilde{E}, r)}{dr} = 0 \quad . \quad (3.38)$$

В основном состоянии электрон отделен потенциальным барьером от области, соответствующей его уходу на бесконечность.

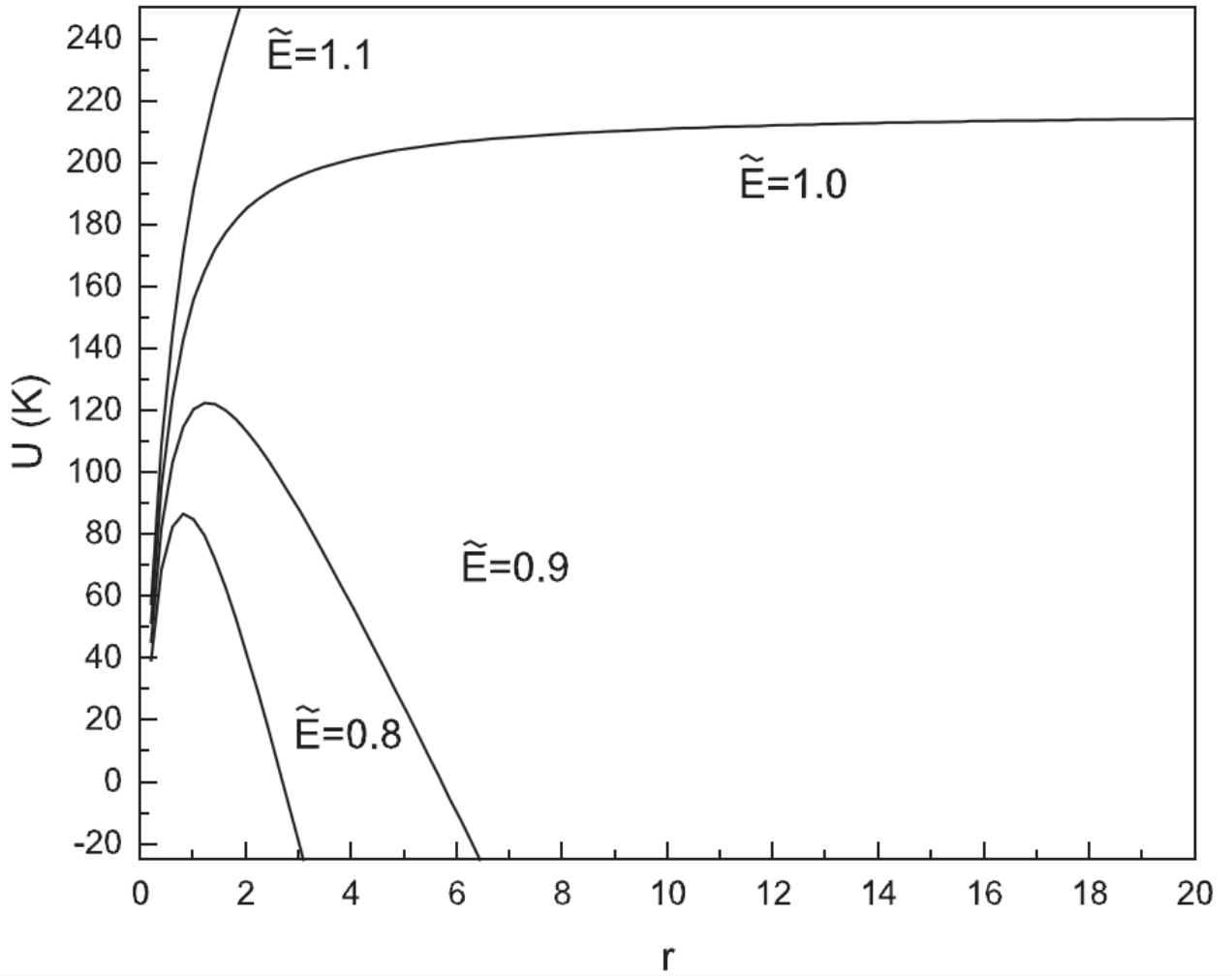


Рис. 3.5 Зависимость потенциальной энергии (3.36) от расстояния r при различных значениях прижимающего поля \tilde{E} .

Высота этого барьера зависит от \tilde{E} и равна:

$$\Delta U(\tilde{E}) = \frac{e^2}{a_0} (f_{ext} - f_{gs}), \quad (3.39)$$

где

$$f_{gs} = f(r_1) = -\frac{\eta}{r_1}, \quad f_{ext} = f(r_{ext}) \quad . \quad (3.40)$$

Следовательно,

$$\Delta U(\tilde{E}) = \frac{e^2}{a_0} \left(f_{ext} + \frac{\eta}{r_1} \right) . \quad (3.41)$$

Существуют два канала ухода (испарения) электрона с поверхности вигнеровского кристалла: термоактивационный и туннельный. Вероятность первого процесса равна:

$$P_1 = \exp \left(-\frac{\Delta U(\tilde{E})}{k_B T} \right) = \exp \left(-\frac{e^2}{a_0 k_B T} \left(f_{ext} + \frac{\eta}{r_1} \right) \right) . \quad (3.42)$$

Здесь k_B — постоянная Больцмана. Вероятность второго процесса в квазиклассическом приближении определяется формулой:

$$P_2 = \exp \left(-\frac{2e\sqrt{2m_e a_0}}{\hbar} \right) S(\tilde{E}) , \quad (3.43)$$

где

$$S(\tilde{E}) = \int_{r_1}^{r_2(\tilde{E})} \sqrt{f(\tilde{E}, r) + \frac{\eta}{r_1}} dr , \quad (3.44)$$

здесь \hbar — постоянная Планка, а m_e — масса электрона. Поскольку нас интересует случай достаточно слабых прижимающих полей, то с большой точностью можно считать, что эффективная масса электрона совпадает с m_e . Положение точки $r_2(\tilde{E})$ определяется из условия:

$$f(\tilde{E}, r_2) = f_{gs} = -\frac{\eta}{r_1} . \quad (3.45)$$

В пределе слабой недокомпенсации заряда ВК, когда $1 - \tilde{E} \ll 1$ (при так называемых малых «сбросах»), положение точки экстремума $r_{ext} \ll 1$ и выражение (3.37) можно записать в виде:

$$f(\tilde{E}, r) = -\frac{\eta}{r} - \frac{4\pi}{\sqrt{3}} (1 - \tilde{E})(r - r_1) . \quad (3.46)$$

Из (3.38) находим, что:

$$r_{ext} = \sqrt{\frac{\eta\sqrt{3}}{4\pi(1-\tilde{E})}} . \quad (3.47)$$

Следовательно,

$$f_{ext} = f(\tilde{E}, r_{ext}) = -\frac{4}{3^{1/4}} \sqrt{\pi\eta(1-\tilde{E})} \quad (3.48)$$

и

$$\Delta U(\tilde{E}) = \frac{e^2}{a_0} \left(\frac{\eta}{r_1} - \frac{4}{3^{\frac{1}{4}}} \sqrt{\pi\eta(1 - \tilde{E})} \right). \quad (3.49)$$

Таким образом, высота энергетического барьера уменьшается корневым образом при $\tilde{E} \rightarrow 1$. Зависимость ΔU от \tilde{E} при $n_e = 10^9 \text{ см}^{-2}$ представлена на рис. 3.6.

Решая уравнение (3.45) в приближении (3.46), получаем:

$$r_2 = \frac{\eta}{\frac{4\pi}{\sqrt{3}}(1-\tilde{E})r_1} \quad (3.50)$$

и

$$S(\tilde{E}) \sim (r_2 - r_1) \sqrt{f_{ext} + \frac{\eta}{r_1}} \sim \frac{1}{(1-\tilde{E})} \quad (3.51)$$

при $\tilde{E} \rightarrow 1$. График функции $S(\tilde{E})$ также представлен на рис. 3.6. Как показано на рис. 3.6, вероятность туннельного прохождения барьера резко увеличивается при уменьшении прижимающего поля вблизи точки $\tilde{E} = 1$.

Оба процесса (термоактивационный и туннельный) являются статистически независимыми, и, следовательно, полная вероятность «испарения» электрона равна:

$$P(\tilde{E}) = P_1(\tilde{E}) + P_2(\tilde{E}) - P_1(\tilde{E})P_2(\tilde{E}). \quad (3.52)$$

Поскольку с ростом концентрации n_e уменьшается параметр a_0 , определенный в (3.23), то из выражений (3.42) и (3.43) следует, что вклад туннельных процессов

в общую вероятность «испарения» электронов (3.52) увеличивается. Согласно (3.49) и (3.51), зависимость $P(\tilde{E})$ в данном диапазоне прижимающих полей становится более крутой.

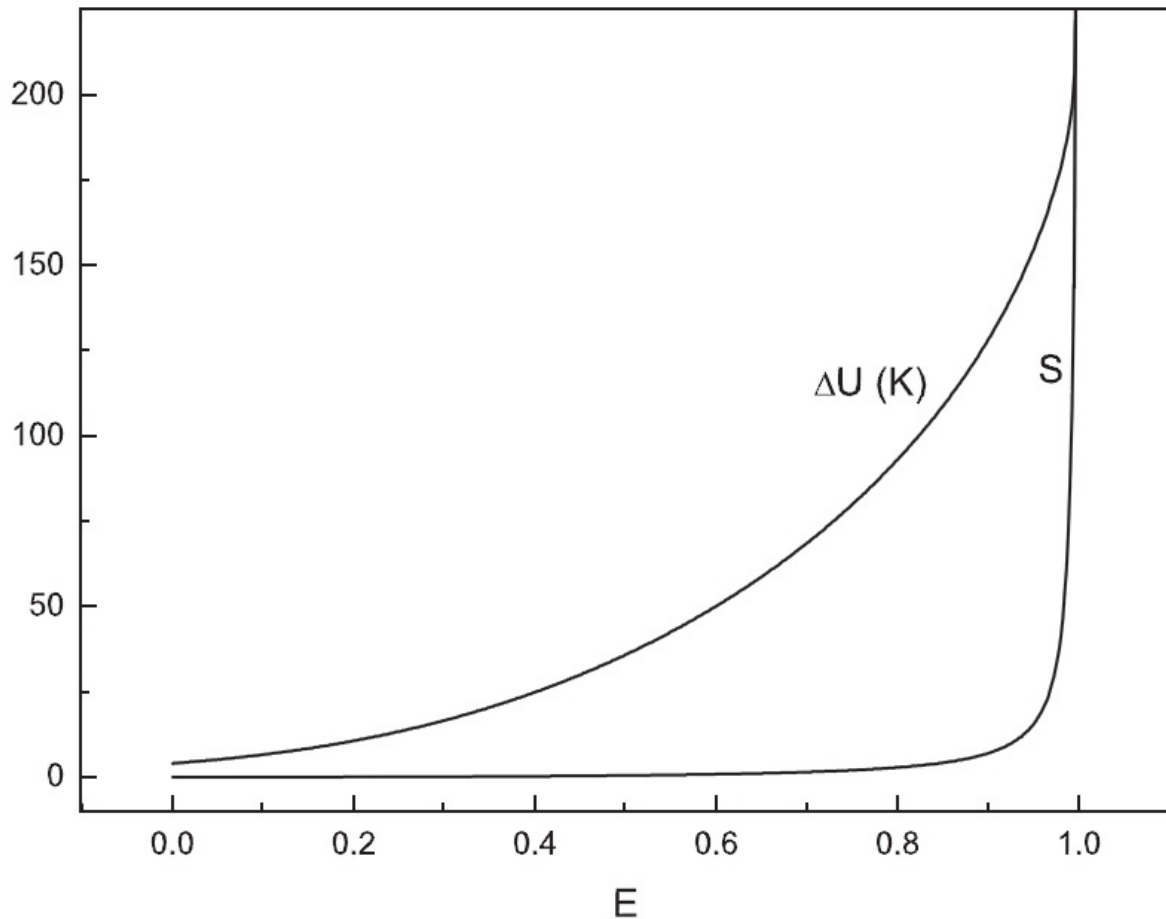


Рис. 3.6 Зависимость энергетической щели ΔU (в градусах К) при $n_e = 10^9 \text{ см}^{-2}$ и туннельного интеграла S (в абсолютных единицах) от прижимающего поля \tilde{E} .

График $P(\tilde{E})$ при различных n_e приведен на рис. 3.7.

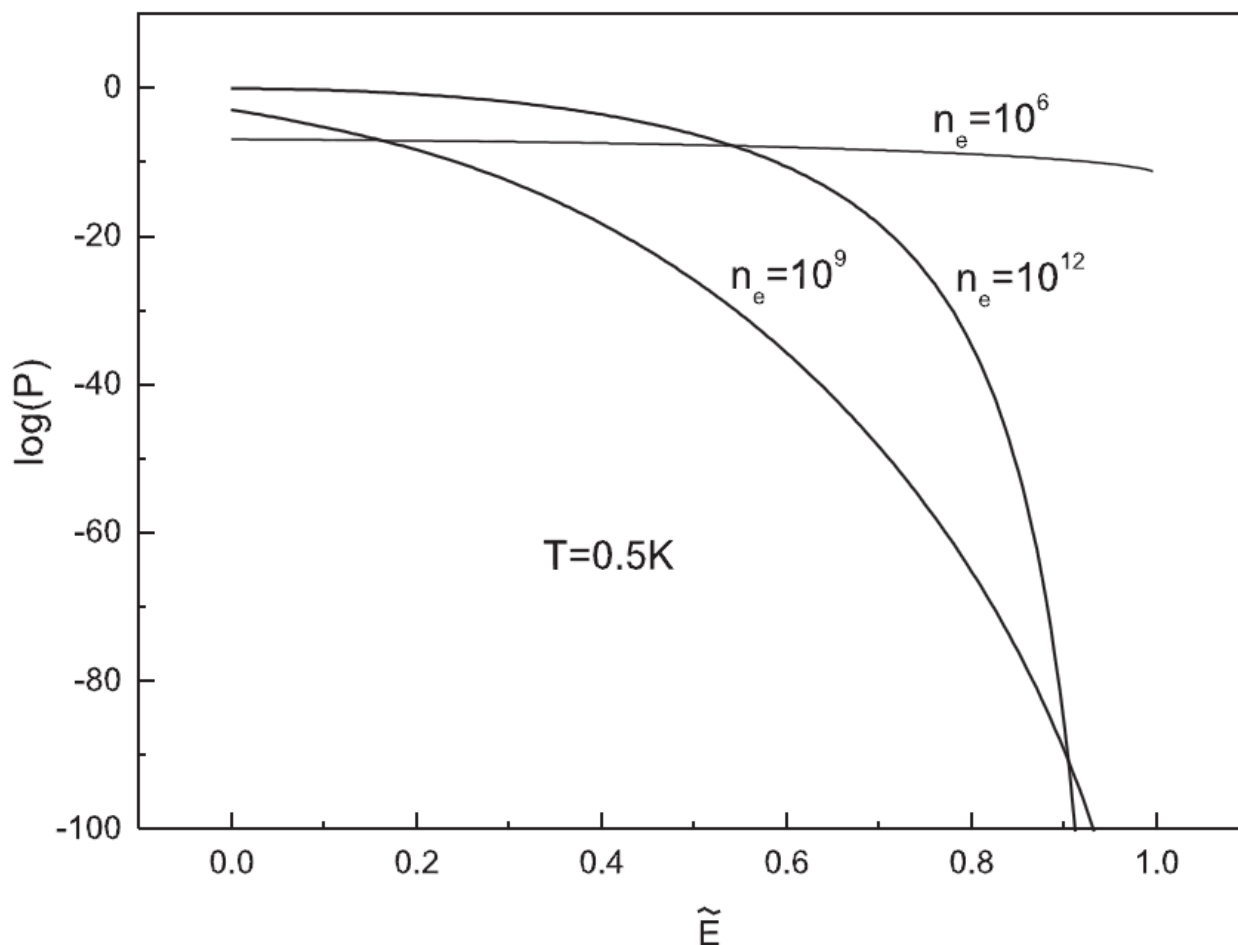


Рис. 3.7 Зависимость вероятности испарения электрона P от прижимающего поля \tilde{E} при различных концентрациях n_e .

Выводы

Изучен механизм разрушения ВК на поверхности жидкого гелия при прижимающих электрических полях, меньших поля полной компенсации заряда. В рамках одноэлектронной модели показано, что данное разрушение происходит за счет ухода («испарения») электронов с поверхности ВК. В прижимающих полях, меньших поля полной компенсации заряда, основное состояние электронов над поверхностью жидкого гелия отделено от области свободного движения потенциальным барьером, параметры которого

определяются концентрацией электронов и величиной прижимающего поля. При «испарении» электроны преодолевают этот барьер как термоактивационным путем, так и за счет туннелирования. На основании предложенного механизма можно объяснить результаты, полученные в [72]. В этой работе изучались компоненты комплексной обратной проводимости ВК. При помощи кольцевого электрода, расположенного вблизи границы измерительной ячейки, создавалось слабое электромагнитное поле. Отклик от ВК детектировался при помощи второго (измерительного) кольцевого электрода, расположенного в центральной части данной ячейки. Измерения проводились при различных значениях прижимающего поля. В результате были получены зависимости амплитуды и фазы детектируемого сигнала как функция прижимающего поля. При сбросе прижимающего поля наблюдалось скачкообразное изменение этих величин. Мы предполагаем, что данный эффект обусловлен «испарением» электронов с поверхности ВК. Часть этих электронов уходит на верхний электрод, а часть формирует электронное облако, расположенное над поверхностью ВК. Поскольку электропроводность электронного газа выше, чем ВК, то возрастает и детектируемый сигнал. Тот факт, что многократное повторение эксперимента приводит к уменьшению E_0 , также подтверждает наше предположение об «испарении» электронов и их частичном уходе на верхний электрод, кроме того, уход электронов с поверхности приводит к уменьшению площади последнего, а во все формулы, позволяющие определять компоненты обратной проводимости ВК по амплитуде и фазе детектируемого сигнала, входит радиус ВК. При возбуждении электронов электрическим полем достаточно большой амплитуды, действующим в плоскости ВК, электронное облако разрушается, поскольку увеличивается кинетическая энергия электронов и часть из них под воздействием прижимающего поля возвращается на поверхность ВК, преодолев

энергетический барьер в потенциале (3.36). Следует отметить, что при типичных значениях параметров в эксперименте [72] характерные значения $P(\tilde{E})$ оказываются микроскопическими, даже с учетом перестройки позиций электронов в плоскости при образовании вакансии [71] (см. рис. 3.7). Скорее всего, процесс «испарения» электронов происходит в основном вблизи границ ВК, где корреляции ослаблены и энергия образования вакансии существенно уменьшается. Кроме того, в данном эксперименте изучалось поведение ВК при малых «сбросах» прижимающего поля ($1-\tilde{E} \approx 0,1$). В этом случае процесс «испарения» происходит крайне медленно (диффузионным образом) и электрон может потерять корреляционную связь со своим окружением [71], что приводит к уменьшению эффективной высоты потенциального барьера. Тем не менее, поскольку времена проведения эксперимента составляют десятки минут, то данный процесс может оказывать существенное влияние на поведение системы. Окончательную точку в вопросе об адекватности предложенной модели мог бы дать эксперимент, проведенный при более высокой концентрации электронов n_e . В соответствии с (3.42) и (3.43) скачки амплитуды и фазы детектируемого сигнала должны становиться более резкими с ростом n_e .

Таким образом, впервые было показано, что процесс туннелирования в двумерной системе электронов высокой плотности над поверхностью жидкого гелия является основным источником динамической неустойчивости фазы вигнеровского кристалла. Установлено, что при низкой концентрации электронов процесс термоактивации дает наибольший вклад в испарение электронов.

РАЗДЕЛ 4

ФРУСТРИРОВАННАЯ РЕШЕТКА ТИПА ШАСТРЫ-САЗЕРЛЕНДА

В последнее время свойства двумерных соединений с магнитной решеткой типа Шастры-Сазерленда "Shastry-Sutherland Lattice" (SSL) все больше привлекают внимание исследователей. Существует множество теоретических и экспериментальных, фундаментальных и прикладных работ, посвященных этой тематике. Эти системы интересны благодаря множеству необычных магнитных свойств, проявляющихся в различных соединениях.

Структура SSL может быть описана четырьмя антиферромагнитными обменами J и одним дополнительным обменным интегралом J' , как показано на рис.4. 1. В случае, когда J гораздо больше J' такая спиновая система ведет себя как обычный антиферромагнетик, если же обмен J' преобладает, то система представляет собой газ слабосвязанных димеров. Наибольший интерес представляет собой ситуация когда J и J' - величины одного порядка. Как известно, первоначально такая решетка исследовалась исключительно как абстрактная модель [23]. Шастры и Сазерленд, нашли некоторую собственную волновую функцию, являющуюся собственной функцией гамильтониана, и показали с помощью вариационного принципа, что она является волновой функцией основного состояния в определенном диапазоне параметров гамильтониана.

Однако, примерно через 10 лет выяснилось, что некоторые реально существующие соединения имеют магнитную структуру, топологически эквивалентную решетке Шастры-Сазерленда. Прежде всего это купратоборат стронция $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$, впервые синтезированный Смитом и Келцером [102]. Это соединение имеет слоистую структуру, состоящую из плоскостей $\text{Cu}(\text{VO}_3)$, разделенных немагнитными атомами стронция. Ионы меди Cu_2 со спином

$S = 1/2$ образуют решетку, топологически эквивалентную решетке Шастры-Сазерленда.

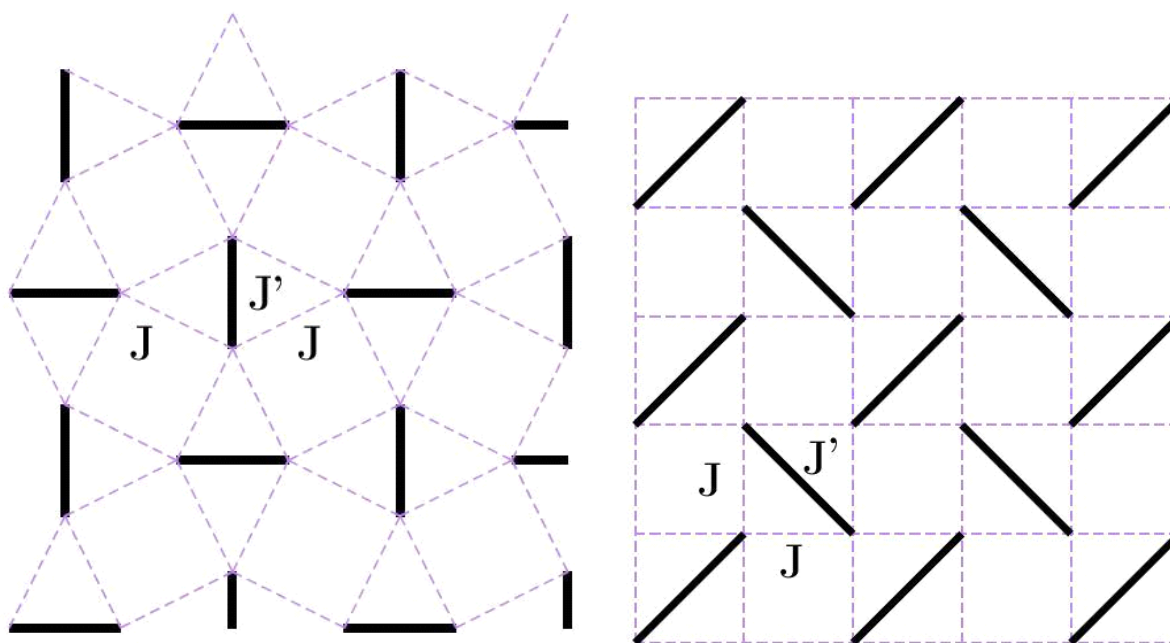


Рис. 4.1 Решетка Shastry-Sutherland, эквивалентные отображения [87-88].

Позднее было обнаружено, что целый ряд тетраборидов редкоземельных ионов RB_4 [80-83] также имеют магнитную структуру, топологически эквивалентную решетке Шастры-Сазерленда.

В этих соединениях суммарный магнитный момент ионов много больше единицы, что позволяет во многих случаях использовать классические модели для их описания.

Кристаллы RB_4 имеют тетрагональную структуру с пространственной группой $P4$. Ионы редкоземельных элементов расположены в плоскостях (001) на подрешетке, состоящей из R-R димеров, альтернированных и ортогональных направлению [110]. Эта подрешетка топологически эквивалентна решетке

Шастры-Сазерленда.

Установлено, что большое количество реальных соединений имеет магнитную структуру, эквивалентную SSL. В экспериментах эти соединения проявляют множество интересных особенностей. Например, в зависимости намагниченности M от поля h существует ряд плато. Эти плато отвечают намагниченности $M=M_{sat} = 1/8, 1/4, 1/3, 1/2$, которые наблюдались в различных соединениях. Как отмечалось выше, первые измерения особенностей намагниченности были проведены на соединении $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$. Так как квантовые свойства ионов меди хорошо известны, квантовая SSL модель также интенсивно изучалась. В то же время в редкоземельных тетраборидах ионы демонстрируют большой угловой момент, который оправдывает использование классической модели Гайзенберга для ее описания. Показано что даже в классическом пределе в рамках изотропной SSL модели существует некоторая особенность в зависимости $M(h)$ при $M=M_{sat} = 1/3$ при соотношении обменных констант $J'/J \approx 2$. Эта особенность может быть идентифицирована как псевдо-плато. Было показано, что обменная анизотропия влияет на псевдо-плато. Наша основная цель состояла в исследовании влияния соотношения обменных констант и легкой осевой анизотропии на термодинамические свойства двумерной SSL с использованием Монте-Карло моделирования в рамках классической модели Гайзенберга.

4.1. Классическая модель Гейзенберга на решетке типа Шастры-Сазерленда

Гамильтониан рассматриваемой системы можно представить в виде:

$$H = \sum_{\langle i, \delta \rangle} \vec{s}_i \hat{J} \vec{s}_{i+\delta} + \sum_{\langle i, \delta' \rangle} \vec{s}_i \hat{J}' \vec{s}_{i+\delta'} - \vec{h} \sum_i \vec{s}_i \quad . \quad (4.1)$$

Здесь \vec{s}_i это классические векторы единичной длины ($|\vec{s}_i| = 1$). Символ $\langle i, \delta \rangle$ в первом члене означает что суммирование производится по четырем соседям для каждого спина с номером i . А во втором члене $\langle i, \delta' \rangle$ означает, что суммирование происходит по всем диагональным связям. Последний член представляет собой энергию взаимодействия спинов с магнитным полем \vec{h} . Элементы диагональных матриц \hat{J} и \hat{J}' - это обменные константы.

$$\hat{J} = \begin{pmatrix} J_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & J_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & J_{zz} \end{pmatrix} \quad \hat{J}' = \begin{pmatrix} J'_{xx} & 0 & 0 \\ 0 & J'_{yy} & 0 \\ 0 & 0 & J'_{zz} \end{pmatrix} \quad (4.2)$$

$$(J_{\alpha\alpha} > 0, \quad \alpha = x, y, z).$$

Множество интересных особенностей было обнаружено в SSL в рамках классической модели при помощи алгоритма Метрополиса метода Монте-Карло. Стоит отметить, что наряду с очевидными преимуществами этого метода (простота и универсальность) в нем присутствует и ряд недостатков. Наиболее важный из них это низкая эффективность в низкотемпературном регионе, а специфические характеристики SSL проявляются в полной мере лишь при низких температурах. Также низкая эффективность алгоритма метрополиса приводит к ограничениям в размерах системы (насколько известно, максимальный размер подобных систем изучаемый этим методом порядка 40x40 частиц). Как результат, вопрос о влиянии граничных условий на такую маленькую систему остается открытым. В этой работе мы предлагаем параллельный алгоритм Монте-Карло моделирования основанный на так называемом методе горячей ванны (heat-bath). Этот метод значительно увеличивает вычислительную эффективность при низких температурах. В рамках метода горячей ванны вероятность перехода от старой конфигурации s к новой s' имеет вид:

$$w(s, s') = \frac{f_\alpha(s, s')}{\sum_{\{s'\}} f_\alpha(s, s')} \quad (4.3)$$

Символ $\{s'\}$ означает суммирование по всем возможным новым конфигурациям. Для расчета вероятности осуществления процесса f_α выбирался метод Метрополиса в виде:

$$f_\alpha(s, s') = \exp(-\beta[E(s') - E(s)]) , \quad (4.4)$$

где $\beta = 1/k_B T$ - обратная температура, а $E(s)$ - энергия системы с конфигурацией спинов s . В этом случае вероятность перехода (4.2) зависит лишь от новой конфигурации s' и приобретает форму

$$w(s, s') = \frac{\exp(-\beta E(s'))}{\sum_{\{s'\}} \exp(-\beta E(s'))} . \quad (4.5)$$

Будем использовать подход, при котором состояния s и s' отличаются всего одним спином.

Введем:

$$\vec{S}_i = \sum_{\delta} \hat{J} \vec{S}_{i+\delta} + \vec{J}' \vec{S}_{i+\delta} - \vec{h} \quad . \quad (4.6)$$

Тогда

$$E(s') = E(\vec{S}_i) = \sum_{\delta} \vec{S}_i \hat{J} \vec{S}_{i+\delta} + \vec{S}_i \vec{J}' \vec{S}_{i+\delta} - \vec{h} \vec{S}_i = \vec{S}_i \vec{S}_i \quad (4.7)$$

и

$$w(s, s') = \frac{\exp(-\beta E(s'))}{Z_i} = \frac{\exp(-\beta \vec{S}_i \vec{S}_i)}{Z_i} = \frac{\exp(\xi S_i)}{Z_i} . \quad (4.8)$$

Здесь $\xi = \cos(\pi - \theta)$ угол между векторами \vec{S}_i и \vec{S}_i . Выбор ξ определяется антиферромагнитным взаимодействием между спинами. Z_i это нормализационная константа в знаменателе (4.5). В нашем случае:

$$Z_i = \int_{-1}^1 \exp(\xi S_i) d\xi = \frac{2}{S_i} \sinh(S_i) . \quad (4.9)$$

Отсюда

$$w(s, s') = \frac{2}{S_i} \sinh(S_i) \exp(\xi S_i) . \quad (4.10)$$

Осуществляя нелинейную выборку белого шума

$$\gamma(\xi) = \int_{-1}^{\xi} w(s, s') d\xi' = \frac{\exp(\xi S_i) - \exp(S_i)}{2 \sinh(S_i)}, \quad (4.11)$$

получаем конечную формулу:

$$\xi_r = \cos(\pi - \theta) = \frac{1}{S_i} \ln(\exp(S_i) - \gamma_0^r [\exp(S_i) - \exp(-S_i)]), \quad (4.12)$$

где γ_0^r - равномерно распределенная случайная величина ($0 < \gamma_0^r < 1$). Это выражение имеет следующее значение. Введем полярную систему координат с осью z $\parallel (-\vec{S}_i)$ и произвольными осями x и y перпендикулярными вектору \vec{S}_i . В этом случае (4.12) дает вероятность перехода спина \vec{S}_i в новое состояние как функцию от полярного угла θ . В соответствии с энергией вырождения азимутального угла φ можно выбрать $\varphi = 2\pi\gamma_1^r$, ($0 < \gamma_0^r < 1$).

Совершая обратное преобразование к декартовым координатам, получаем:

$$\vec{S}_i = \begin{cases} x = n_z \sqrt{\frac{1-\xi_r^2}{l_1}} \cos(\varphi) \\ y = n_z \sqrt{\frac{1-\xi_r^2}{l_2}} \sin(\varphi) \\ z = \frac{\xi_r - xn_x - yn_y}{n_z} \end{cases}, \quad (4.13)$$

где

$$\vec{n} = \frac{\vec{S}_i}{|\vec{S}_i|} = \{n_x, n_y, n_z\} \quad (4.14)$$

$$l_1 = a \cos^2(\varphi_0) + b \sin^2(\varphi_0) - c \sin(\varphi_0) \cos(\varphi_0) \quad (4.15)$$

$$l_2 = a \cos^2(\varphi_0) + b \sin^2(\varphi_0) + c \sin(\varphi_0) \cos(\varphi_0) \quad (4.16)$$

$$a = n_x^2 + n_z^2 \quad b = n_y^2 + n_z^2 \quad c = n_x n_y \quad \varphi_0 = \arctan\left(\frac{c}{b-a}\right).$$

Конечное выражение (4.10) описывает вероятность перехода системы как функцию от однородно распределенных случайных величин γ_0^r и γ_1^r . Алгоритм

описанного Монте-Карло моделирования был написан под вычисления на кластере и апробирован на точнорешаемых моделях. Кроме самого моделирования еще был реализован алгоритм поиска конфигураций, отвечающих минимуму внутренней энергии. Анализ свойств таких конфигураций чрезвычайно важен для изучения структуры основного состояния решетки Шасти-Сазерленда.

4.2. Результаты, полученные для решетки типа Шастры-Сазерленда в рамках классической модели Гейзенберга и их обсуждение

Одна из отличительных черт магнитной структуры SSL это ступенчатое поведение намагниченности в поле. Такое поведение проявляется даже в случае изотропного спин-спинового обменного взаимодействия. В рамках классической модели Гейзенберга плато намагниченности возникает при значении $M = 1/3$. Поведение $M(h)$, полученное при помощи нашего подхода для изотропного случая и $\vec{h} || \vec{z}$ представлено на Рис. 4.2(a). Здесь $J_{\alpha\alpha} = 1$, $J'_{\alpha\alpha} = 2$, $\alpha = x, y, z$, температура $T = 0,02$ и размер системы 48×48 . Необходимо подчеркнуть, что наши результаты хорошо согласуются с литературными данными [88-94,105-109].

На первом шаге нашего исследования мы изучили влияние обменной анизотропии на полочку намагниченности. Соответствующая зависимость представлена на рис. 4.2(b). Здесь $J_{xx} = J_{yy} = 1$, $J'_{xx} = J'_{yy} = 2$, $J_{zz} = 1 + \alpha$, $J'_{zz} = 2J_{zz}$ и $\alpha = 0,05$.

Можно видеть, что даже слабая анизотропия (5%) приводит к существенному увеличению ширины плато. Подобное влияние оказывает и одноионная анизотропия [89,90]. Оказалось, что кривые отвечающие различным размерам системы 48×48 и 24×24 находятся в хорошем согласии друг с другом.

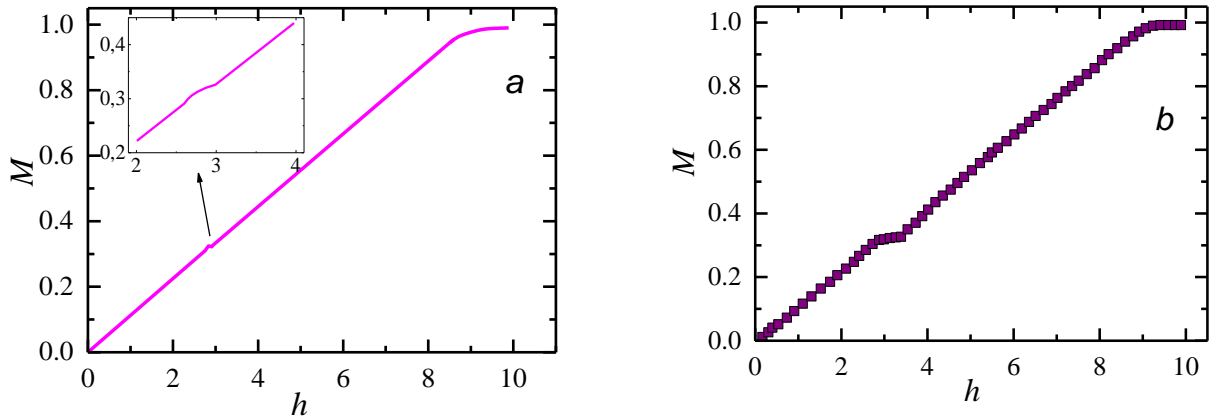


Рис. 4.2 зависимость намагниченности M от внешнего магнитного поля h , $\mu = \frac{J'}{J} = 2$. a – размер системы 24×24 , $\alpha = 0$ (изотропный случай). Окрестность псевдо плато в области представлена на вставке. b – 48×48 . параметр анизотропии $\alpha = 0,02$. Температура $T = 0,02$ в обоих случаях.

Это означает то, что граничные условия мало влияют на результат, и то, что теоретическое исследование систем таких размеров полностью обосновано. Зависимость ширины плато Δ , отвечающей $M = 1/3$ в зависимости от параметра анизотропии α представлена на рис. 4.3.

Спиновые конфигурации отвечающие намагниченности $M = 1/3$ описаны в [87]. Полученные данные (в заполненных квадратах) были аппроксимированы функцией $\Delta = A\alpha^{1/k}$, наилучшее совпадение имеет место при $A = 0,36$ и $k = 1,73$, что очень близко к $\sqrt{3}$.

На втором шаге исследования мы определили область ступенчатой особенности намагниченности как функцию от соотношения констант $\mu = J'/J$. Зависимость ширины плато Δ от μ при $\alpha = 0,005$ представлена на рис. 4.4.

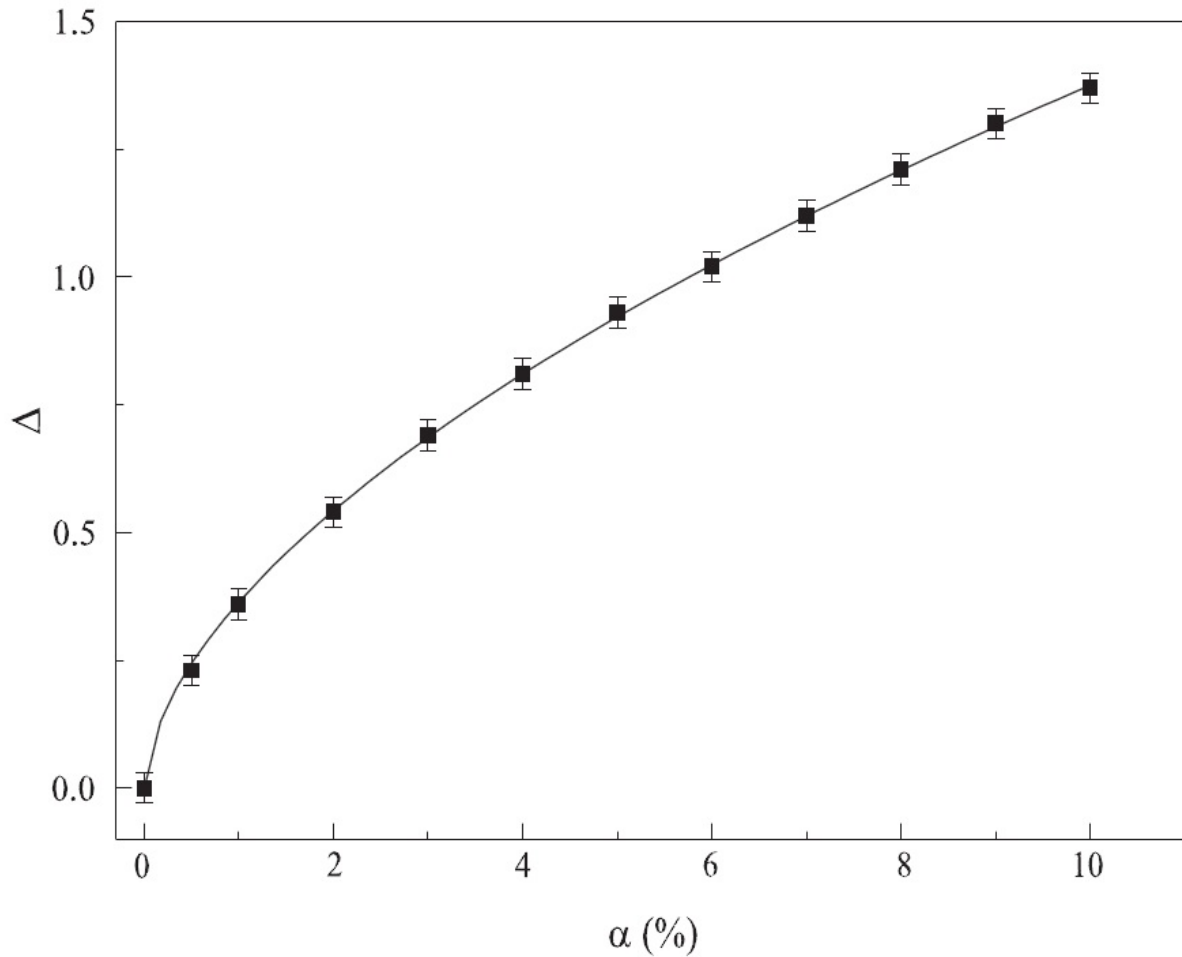


Рис 4.3 Зависимость ширины плато намагниченности Δ , отвечающему $M = 1/3$ от параметра анизотропии α . Размер системы $24 \times 24 \mu = \frac{J'}{J} = 2$, $T = 0,02$.

Можно видеть, что в фазе, соответствующей намагниченности $M = 1/3$ плато существует в области $1,5 < \mu < 2,4$. На следующем этапе мы изучили температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости.

$$C = \frac{1}{T^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2) \quad (4.17)$$

$$\chi = \frac{1}{T} (\langle M^2 \rangle - \langle M \rangle^2). \quad (4.18)$$

Здесь $\langle E \rangle$ и $\langle E^2 \rangle$ - термодинамические средние значения энергии и квадрата энергии, соответственно.

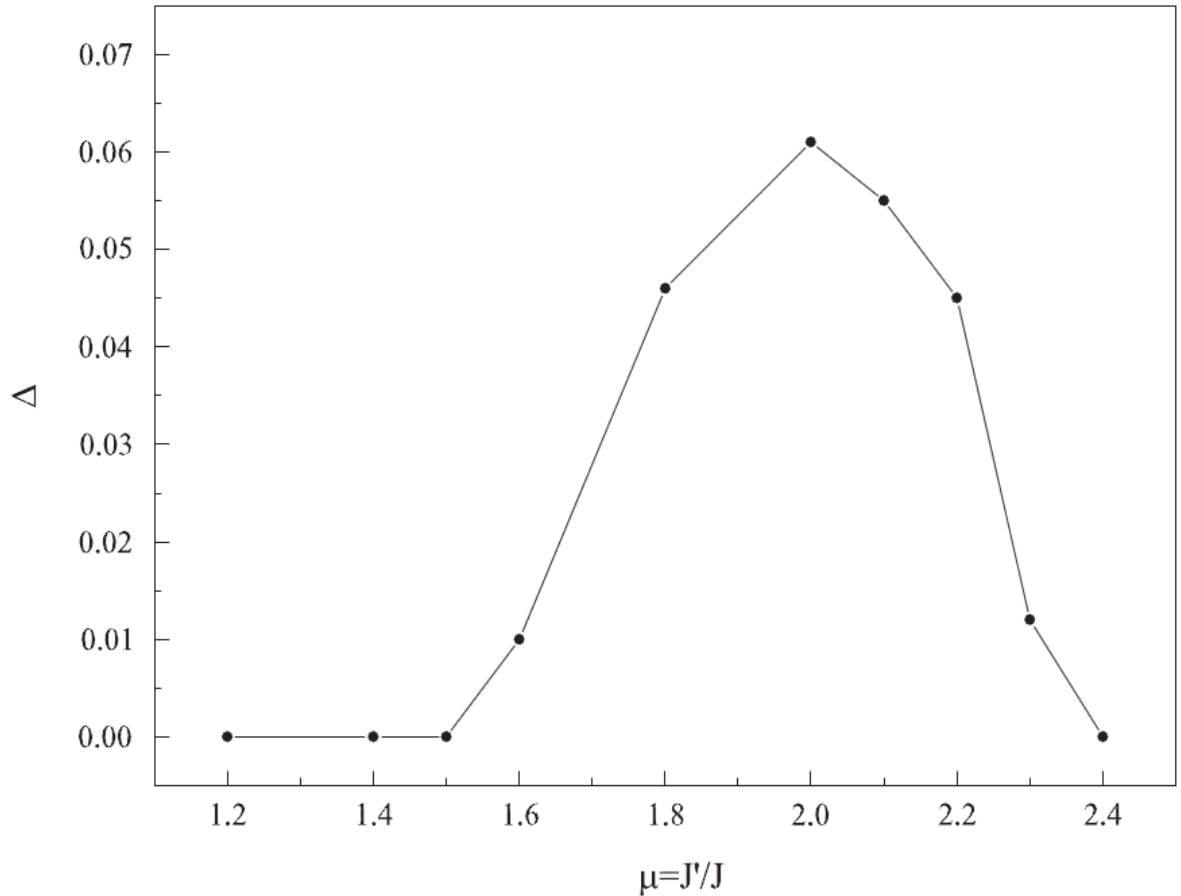


Рис. 4.4 Зависимость ширины плато намагниченности Δ , отвечающей $M = 1/3$ от соотношения обменных констант $\mu = \frac{J'}{J}$. Размер системы 24×24 , $T = 0,02$.

Эти средние значения также были рассчитаны в процессе Монте-Карло моделирования. Хорошо известно, что скачки в этих величинах могут служить индикаторами фазовых переходов т. к. поведение теплоемкости и магнитной восприимчивости наиболее чувствительны к изменениям состояния антиферромагнитных соединений. Анализируя эти кривые для различных значений μ можно построить график зависимости критической температуры фазового перехода T_N от соотношения обменных констант μ . Как видно из рис. 4.5 зависимость $T_N(\mu)$ – линейная. Для соотношения $\mu = J'/J = 0.33$ критическая температура $T_N \approx 0.65$. В пересчете на энергетические единицы для

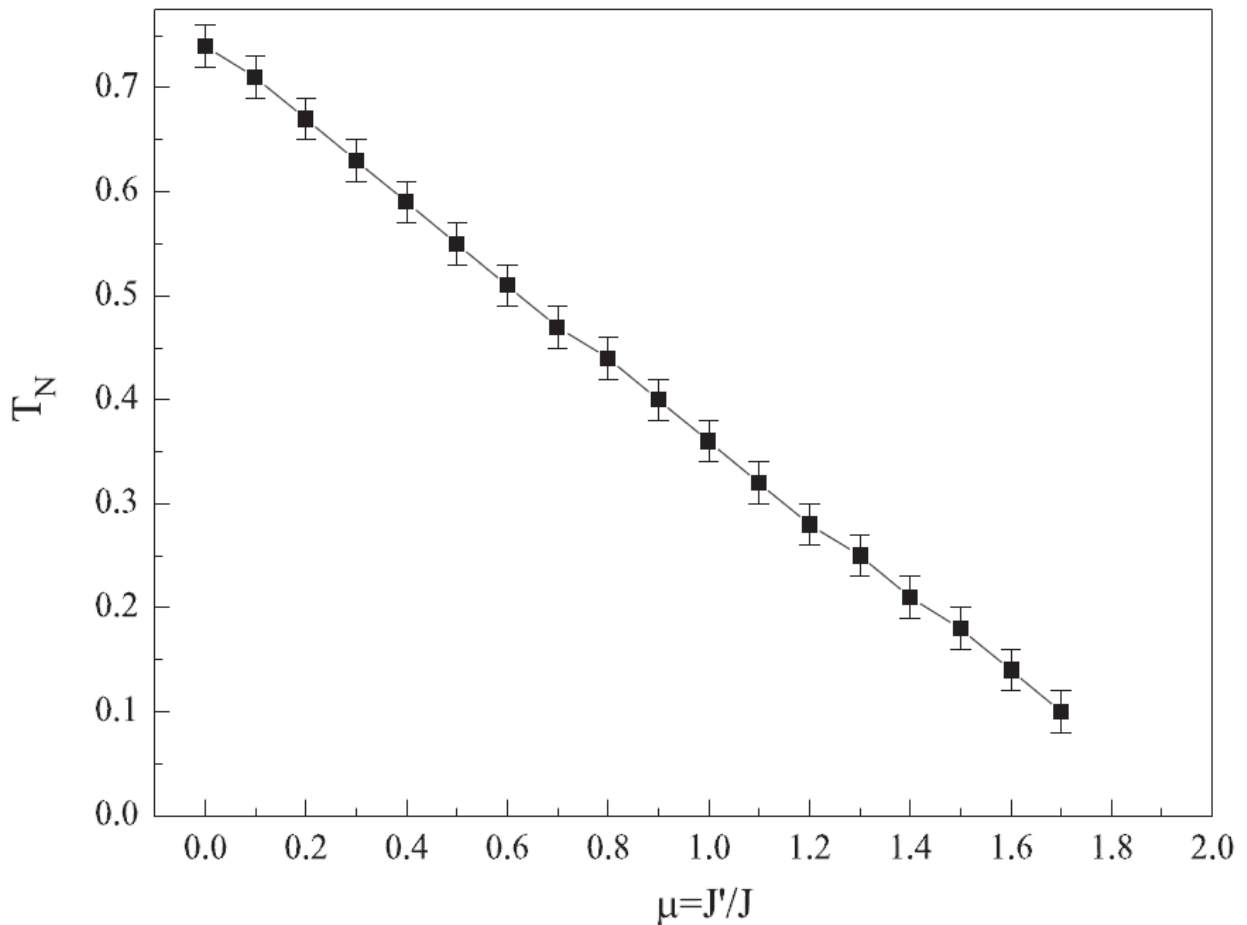


Рис 4.5 Зависимость критической температуры T_N от соотношения обменных констант $\mu = \frac{J'}{J}$ в изотропном случае. Размер системы 24×24 , $h = 0$.

$\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$, в котором именно такое соотношение обменных констант мы получили $T_N \approx 9.75\text{K}$, что очень близко к экспериментально измеренной $T_N \approx 10\text{K}$. Существует предположение о том что температура перехода является следствием конечности системы, т к в соответствии с теоремой Мермина-Вагнера в бесконечной системе эта температура должна быть нулевой. Опираясь на это предположение можно сделать вывод, что образцы представляют собой порошок из пластин характерного линейного размера

минимум 24 атомов. В нашем исследовании никаких особенностей поведения системы ниже T_N в классической модели SSL не наблюдается. Косвенно это может указывать на то, что необычное поведение магнитной восприимчивости при низких температурах имеет квантовое происхождение.

В дополнение к проведенному вычислению мы также произвели несколько моделирований с использованием мультканонического метода Монте-Карло, описанного в [64]. Результаты моделирований находятся в хорошем согласии друг с другом.

4.3. Магнитные свойства квантовой модели Шастры-Сазерленда со спином $S=1/2$

Гамильтониан системы имеет вид:

$$H = \frac{J_{xx}}{2} \sum_{\langle \vec{r}_i, \vec{r}_j \rangle} (\hat{S}_{\vec{r}_i}^x \hat{S}_{\vec{r}_j}^x + \hat{S}_{\vec{r}_i}^y \hat{S}_{\vec{r}_j}^y) + \frac{J_z}{2} \sum_{\langle \vec{r}_i, \vec{r}_j \rangle} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z \hat{S}_{\vec{r}_j}^z + \frac{J'_{xx}}{2} \sum_{\vec{r}_i, \vec{\delta}_i} (\hat{S}_{\vec{r}_i}^x \hat{S}_{\vec{r}_i + \vec{\delta}_i}^x + \hat{S}_{\vec{r}_i}^y \hat{S}_{\vec{r}_i + \vec{\delta}_i}^y) + \frac{J'_z}{2} \sum_{\vec{r}_i, \vec{\delta}_i} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z \hat{S}_{\vec{r}_i + \vec{\delta}_i}^z - h \sum_{\vec{r}_i} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z. \quad (4.19)$$

Здесь $\vec{r}_i = (x_i, y_i)$ - координаты узлов решетки; $i=1, 2, \dots, N$, где N - общее количество узлов. Символ $\langle \dots \rangle$ означает суммирование по 4-м ближайшим (вертикальным и горизонтальным) соседям. $\vec{\delta}_i$ - радиус-вектор, соединяющий i -й спин с его 5-м (диагональным) соседом в решетке. $\hat{S}_{\vec{r}_i}^x$, $\hat{S}_{\vec{r}_i}^y$ и $\hat{S}_{\vec{r}_i}^z$ - компоненты спинового оператора на узле \vec{r}_i

$$\vec{\hat{S}} = (\hat{S}_x, \hat{S}_y, \hat{S}_z) = \frac{1}{2} \vec{\hat{\sigma}} = (\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z), \quad (4.20)$$

где $\hat{\sigma}_x, \hat{\sigma}_y, \hat{\sigma}_z$ - соответствующие матрицы Паули. J_{xx} и J_z - константы обменного взаимодействия с ближайшими соседями, а J'_{xx} и J'_{zz} константы обменного взаимодействия с 5-м (диагональным) соседом. Мы будем

рассматривать случай антиферромагнитного взаимодействия, когда все обменные константы неотрицательны. В знаменателях при обменных константах стоят двойки, необходимые для компенсации двукратного учета связей. h - внешнее магнитное поле, приложенное вдоль оси z . Все константы в (4.19) обезразмерены.

Как указывалось в Разделе 1, в данной работе в качестве инструмента исследования был использован метод точной диагонализации. Прежде всего, необходимо выбрать базис, в котором будут вычисляться матричные элементы. Для xxz модели наиболее удобным является базис, построенный на собственных функциях $|S_z\rangle$ оператора \hat{S}_z :

$$|S_z\rangle = \frac{1}{2}(0, 1), \quad |S_z\rangle = \frac{1}{2}(1, 0) \quad (4.21)$$

Базисные волновые функции имеют вид:

$$|\psi\rangle = |S_{r_1}^z\rangle \otimes |S_{r_1}^z\rangle \otimes |S_{r_2}^z\rangle \otimes \dots \otimes |S_{r_N}^z\rangle \quad (4.22)$$

Для того, чтобы изучать системы достаточно большого (по меркам метода точной диагонализации) размера, необходимо использовать все интегралы движения. Наличие интеграла движения позволяет выделить инвариантные подпространства в полном пространстве состояний изучаемой системы и, следовательно, сократить размерности матриц, которые необходимо диагонализировать. Легче всего это сделать, если базисные функции $|\psi\rangle$ являются собственными функциями оператора, соответствующего данному интегралу движения. Действительно, пусть \hat{A} - интеграл движения ($[\hat{A}, \hat{H}] = 0$). Поскольку $|\psi\rangle$ - собственные функции оператора \hat{A} , то $\hat{A}|\psi\rangle = a_k|\psi\rangle$, где a_k - соответствующие собственные значения ($k=1,2,\dots, K$).

Введя обозначения $|\psi_k\rangle (\hat{A}|\psi_k\rangle = a_k|\psi_k\rangle)$, получаем:

$$\langle \psi_k | \hat{H} | \psi_k \rangle = 0, \quad (4.23)$$

если $k \neq k'$. Пространство состояний при этом разбивается на инвариантные подпространства, количество которых равно количеству собственных значений интеграла движения - K . Матрица \hat{H} приобретает блочно-диагональную структуру и, следовательно, может быть записана в виде прямой суммы:

$$\hat{H} = \hat{H}_1 \oplus \hat{H}_2 \oplus \dots \oplus \hat{H}_K. \quad (4.24)$$

Здесь \hat{H}_k - операторы, действующие в соответствующих инвариантных подпространствах. Тогда:

$$\det(\hat{H}) = \prod_{k=1}^K \det(\hat{H}_k). \quad (4.25)$$

Таким образом, диагонализации матриц, соответствующих операторам \hat{H}_k , можно производить независимым образом.

Рассмотрим сначала случай $h=0$ и запишем гамильтониан системы (4.19) в виде:

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - h \sum_{\vec{r}_i} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z = \hat{H}_0 - h \hat{M}_z \quad (4.26)$$

Здесь \hat{H}_0 - часть гамильтониана (4.19), не содержащая магнитное поле, а \hat{M}_z - оператор полной z -й компоненты намагниченности:

$$\hat{M}_z = \sum_{\vec{r}_i} \hat{S}_{\vec{r}_i}^z. \quad (4.27)$$

Функции $|\psi\rangle$ построены на собственных функциях оператора \hat{S}_z и, следовательно, являются собственными функциями оператора \hat{M}_z :

$$\hat{M}_z |\psi_{m_j}\rangle = m_j |\psi_{m_j}\rangle, \quad (4.28)$$

где

$$m_j = -\frac{N}{2}, -\frac{N}{2} + 1, \dots, \frac{N}{2} - 1, \frac{N}{2} = -\frac{N}{2} + j \quad j = 0, 1, \dots, N. \quad (4.29)$$

Поскольку $[\hat{M}_z, \hat{H}] = 0$, пространство состояний системы разбивается на $N+1$ инвариантное подпространство, каждое из которых соответствует

определенному значению намагниченности m_j . Операторы, действующие в данных подпространствах, обозначим \hat{H}_{m_j} :

$$\hat{H}_0 = \hat{H}_{m_0} \oplus \hat{H}_{m_1} \oplus \dots \oplus \hat{H}_{m_N} . \quad (4.30)$$

Как было указано выше, диагонализацию матриц \hat{H}_{m_j} можно производить независимо. Разумеется, суммарная размерность инвариантных подпространств равна полной размерности пространства состояний системы:

$$\dim(\hat{H}_0) = \sum_{j=0}^N \dim(\hat{H}_{m_j}) = \sum_{j=0}^N C_N^j = 2^N . \quad (4.31)$$

Накладывая периодические граничные условия, можно использовать операторы пространственной трансляции вдоль осей x и y : \hat{T}_x , \hat{T}_y . Решетка Шастры-Сазерленда имеет период магнитной решетки вдвое больший, чем период кристаллической решетки и, следовательно, $[\hat{T}_x, \hat{H}] \neq 0$ и $[\hat{T}_y, \hat{H}] \neq 0$. Однако,

$$[\hat{H}_0, \hat{T}_x^2] = [\hat{H}_0, \hat{T}_y^2] = [\hat{T}_x^2, \hat{T}_y^2] = 0 . \quad (4.32)$$

Соответствующие собственные значения (величины решеточного импульса $\vec{k} = (k_x, k_y)$) равны:

$$k_x = \frac{4\pi j}{l_x}, \quad j = 0, 1, \dots, \frac{l_x}{2} - 1 , \quad (4.33)$$

$$k_y = \frac{4\pi j}{l_y}, \quad j = 0, 1, \dots, \frac{l_y}{2} - 1 . \quad (4.34)$$

Здесь l_x и l_y - линейные размеры системы вдоль *направлений* x и y , соответственно ($l_x l_y = N$). Оператор момента коммутирует с квадратами операторов трансляции.

$$[\hat{M}, \hat{T}_x^2] = [\hat{M}, \hat{T}_y^2] = 0 . \quad (4.35)$$

Поэтому операторы \hat{M} , \hat{T}_x^2 и \hat{T}_y^2 можно использовать одновременно. Таким образом, в каждом инвариантном подпространстве, соответствующему какому-либо значению намагниченности m_j , можно выделять инвариантные

подпространства, соответствующие различным значениям решеточного импульса \vec{k} .

Далее, использовались операторы пространственных инверсий \hat{P}_x, \hat{P}_y вдоль осей x и y . Их собственные значения равны $p_x, p_y = \pm 1$.

Симметрия решетки Шастры-Сазерленда такова, что $[\hat{P}_x, \hat{H}] \neq 0$ и $[\hat{P}_y, \hat{H}] \neq 0$. Однако,

$$[\hat{P}, \hat{H}_0] = [\hat{P}, \hat{M}] = 0, \quad (4.36)$$

где $\hat{P} = \hat{P}_x \hat{P}_y$. Очевидно, что собственные значения оператора \hat{P} равны $p = \pm 1$. Кроме того,

$$[\hat{P}, \hat{T}_x^2] = [\hat{P}, \hat{T}_y^2] = 0 \quad \vec{k} = (0, 0), \vec{k} = (\pi, \pi). \quad (4.37)$$

Таким образом, в подпространствах, соответствующих $\vec{k} = (0, 0)$ и $\vec{k} = (\pi, \pi)$ можно одновременно использовать такие интегралы движения, как $\hat{M}, \hat{T}_x^2, \hat{T}_y^2$ и \hat{P} .

В подпространстве, соответствующем нулевому значению намагниченности ($m_j = 0$), использовался также интеграл движения, соответствующий спиновой инверсии \hat{Z} . Его собственные значения $z = \pm 1$.

$$[Z, \hat{H}_0] = [\hat{Z}, \hat{M}] = [\hat{Z}, \hat{P}] = [\hat{Z}, \hat{T}_x^2] = [\hat{Z}, \hat{T}_y^2] = 0. \quad (4.38)$$

Базисные функции характеризуется 5-ю индексами - намагниченностью m_j , решеточным импульсом $\vec{k} = (k_x, k_y)$, пространственной p и спиновой z инверсиями:

$$|\psi_{m_j, k_x, k_y, p, z}\rangle = a_{m_j, k_x, k_y, p, z} \times \\ \times \sum_{j=1}^N \exp(i(x_j k_x + y_j k_y)) \hat{T}_x^{2x_j} \hat{T}_y^{2y_j} \hat{Q} |\psi_{m_j}\rangle. \quad (4.39)$$

Здесь $a_{m_j, k_x, k_y, p, z}$ - нормировочная константа, а $|\psi_{m_j}\rangle$ - любая базисная функция из инвариантного подпространства, соответствующего намагниченности m_j (4.15). Оператор \hat{Q} может быть записан в виде:

$$\hat{Q} = \begin{cases} \hat{I} & m_j \neq 0, \vec{k} \neq (0, 0), \vec{k} \neq (\pi, \pi) \\ (1 + p\hat{P}) & m_j \neq 0, \vec{k} = (0, 0), \vec{k} = (\pi, \pi) \\ (1 + z\hat{Z})(1 + p\hat{P}) & m_j = 0, \vec{k} = (0, 0), \vec{k} = (\pi, \pi) \end{cases} \quad (4.40)$$

где \hat{I} - единичный оператор. Операторы, действующие в соответствующих подпространствах $\hat{H}_{m_j, k_x, k_y, p, z}$, также характеризуются 5-ю индексами. Окончательно получаем выражение для \hat{H}_0 (4.17):

$$\hat{H}_0 = \sum_{j=0}^N \hat{H}_{m_j} \quad , \quad (4.41)$$

где

$$\hat{H}_{m_j} = \sum_{k_x, k_y, p, z} \hat{H}_{m_j, k_x, k_y, p, z} \quad . \quad (4.42)$$

В (4.41) и (4.42) подразумеваются прямые суммы операторов, индексы суммирования в (4.42) принимают следующие значения: k_x и k_y , которые задаются выражениями (4.37) и (4.38) соответственно, а $p, z = \pm 1$.

Полевые зависимости намагниченности были получены следующим образом. Как было указано выше, $[\hat{M}_z, \hat{H}] = 0$. Это значит, что энергия любого состояния линейно меняется во внешнем магнитном поле, которое приложено вдоль оси z , а поскольку каждое инвариантное подпространство соответствует определенному значению магнитного момента m_j , то

$$\varepsilon(h) = \varepsilon - m_j h \quad . \quad (4.43)$$

Здесь ε - любое собственное значение оператора \hat{H}_{m_j} (4.42), действующего в данном инвариантном подпространстве. Таким образом, чтобы получить зависимости энергий от магнитного поля h , достаточно произвести диагонализацию системы без внешнего поля (т.е. диагонализацию \hat{H}_0). Зная зависимости энергий от h , можно получить и интересующие нас зависимости намагниченности системы в основном состоянии как функции внешнего поля - $m(h)$.

Для этого необходимо найти минимальные собственные значения \hat{H}_0 в каждом из инвариантных подпространств, соответствующих всем значениям намагниченности m_j (т.е. минимальные собственные значения операторов \hat{H}_{m_j}).

Используемый нами метод диагонализации Лонцоша [103], является в данном случае оптимальным. Обозначим минимальные собственные значения операторов \hat{H}_{m_j} посредством $\tilde{\varepsilon}_j, j = 0, 1, \dots, N$. Для каждого $\tilde{\varepsilon}_j$ построим зависимость от поля h :

$$\tilde{\varepsilon}_j(h) = \tilde{\varepsilon}_j - m_j h \quad , \quad (4.44)$$

где $m_j = -\frac{N}{2} + \tilde{j}(h)$. Далее, при каждом значении поля h необходимо найти j , реализующее минимум энергий (4.22). Обозначим такое j посредством $\tilde{j}(h)$:

$$\tilde{\varepsilon}_{\tilde{j}(h)}(h) = \min_{j=0,1,\dots,N} \tilde{\varepsilon}_j(h) \quad . \quad (4.45)$$

Тогда $m_j = -\frac{N}{2} + \tilde{j}(h)$. Для удобства часто вводят приведенную намагниченность m^* , т.е. намагниченность, отнесенную к максимальной m_{sat} . В нашем случае:

$$m^*(h) = \frac{2}{N} m(h) = \frac{2\tilde{j}(h)}{N} - 1 \quad . \quad (4.46)$$

На рис. 4.6 представлены зависимости $m^*(h)$, соответствующие различным значениям обменной анизотропии, для системы из 8×4 спинов. Зависимость 1 соответствует изотропному обменному взаимодействию, а зависимость 2 - обменной анизотропии типа "легкая ось" ($J_{xx} = 1, J_z = 1.1, J'_{xx} = 2, J'_z = 2.1$). Помимо общего сдвига зависимости в область больших полей (спин-флоп) видно, что ширины плато, соответствующие $m^* = 1/2, 1/3, 1/4$, увеличиваются. Аналогичный результат для $m^* = 1/3$ был получен в рамках классической модели Гейзенберга в работе [1].

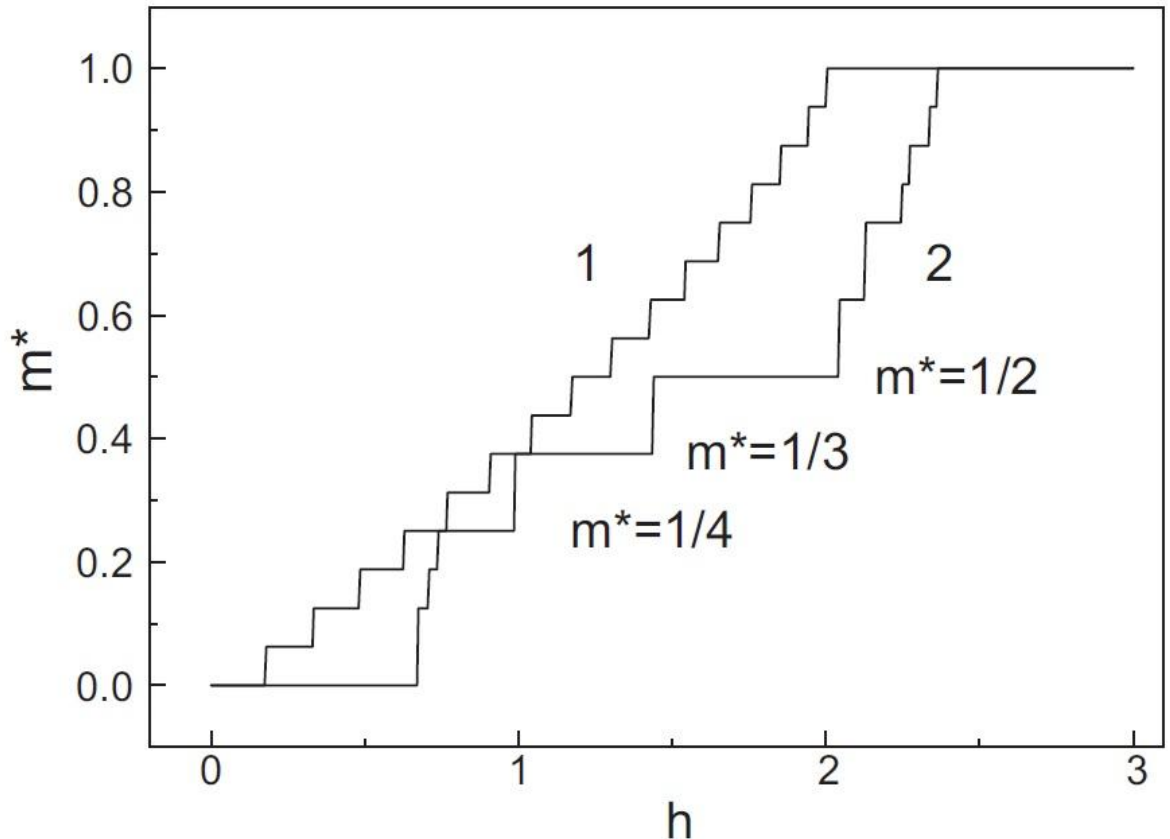


Рис. 4.6 Зависимость приведенной намагниченности m^* от внешнего поля h для случая изотропного обменного воздействия. Зависимость 1 соответствует случаю, когда диагональное взаимодействие отсутствует: $J_z = J_{xx} = 1$, $J'_z = J'_{xx} = 0$. Зависимость 2 получена при $J_z = J_{xx} = 1$, $J'_z = J'_{xx} = 2$. Размеры изучаемой системы - 8×4 .

Таким образом, ряд плато намагниченности, экспериментально наблюдаемых в $\text{SrCu}_2(\text{VO}_3)_2$ [104], может быть получен в рамках xxz модели для решетки Шастры-Сазерленда со спином $1/2$. В то же время, некоторые серии плато намагниченности, наблюдаемые в эксперименте, в наших результатах отсутствуют. Это плато, соответствующие $m^* = 1/k$, где $k = 5, 6, \dots, 9$, а также $m^* = 2/9$. Возможной причиной такого несоответствия является ограниченность размеров системы. Более того, на изучаемую систему накладывались

периодические граничные условия, а в этом случае соизмеримость образующихся магнитных структур и размеров системы может оказывать существенное влияние на получаемые результаты. Важно также отметить, что в данной работе использовалось приближение ближайших соседей. Учет взаимодействий со следующими соседями также может оказать влияние на результаты (см., например, [102], где изучалась т.н. обобщенная решетка Шастры-Сазерленда).

На рис. 4.7 представлены зависимости $m^*(h)$, которые отвечают различным значениям обменной анизотропии, для системы 8×4 спинов. зависимость 1 соответствует изотропному обменному взаимодействию, а зависимость 2 – обменной анизотропии типа "легкая ось" ($J_{xx} = 1, J_z = 1.1, J'_{xx} = 2, J'_z = 2.1$). Кроме общего сдвига зависимости в область больших полей (спин-флоп) видно, что ширины плато, отвечающие $m^* = 1/2, 1/3, 1/4$, увеличиваются. Аналогичный результат для $m^* = 1/3$ был получен в рамках классической модели Гейзенберга.

Отдельно было проведено исследование влияния параметров обменного взаимодействия на ширины плато Δh в зависимости $m^*(h)$. Как было указано выше, обменная анизотропия не оказывает такого существенного влияния на $m^*(h)$, как в случае классической модели Гейзенберга. Поэтому мы ограничились случаем изотропного обмена. Введем $J = J_z = J_{xx}, J' = J'_z = J'_{xx}$ и обозначим их отношение $\alpha = J'/J$. Зависимости Δh , соответствующие $m^* = 1/2, 1/3$ и $1/4$ от α представлены на рис. 4.8.

Как видно из рисунка, существуют три области, характеризующиеся различными типами поведения системы. В области $0 \leq \alpha \lesssim 1.25$ изменение α не оказывает влияния на ширины плато. Они оказываются такими же, как и в случае простой квадратной решетки (т.е. в случае, когда $J'=0$). Эту область можно условно обозначить как область "неелевского" антиферромагнетика.

Далее, в интервале $1.25 \lesssim \alpha \lesssim 1.8$ происходят существенные изменения ширины плато. Это область, где специфические свойства решеток Шастры-Сазерленда проявляются в полной мере.

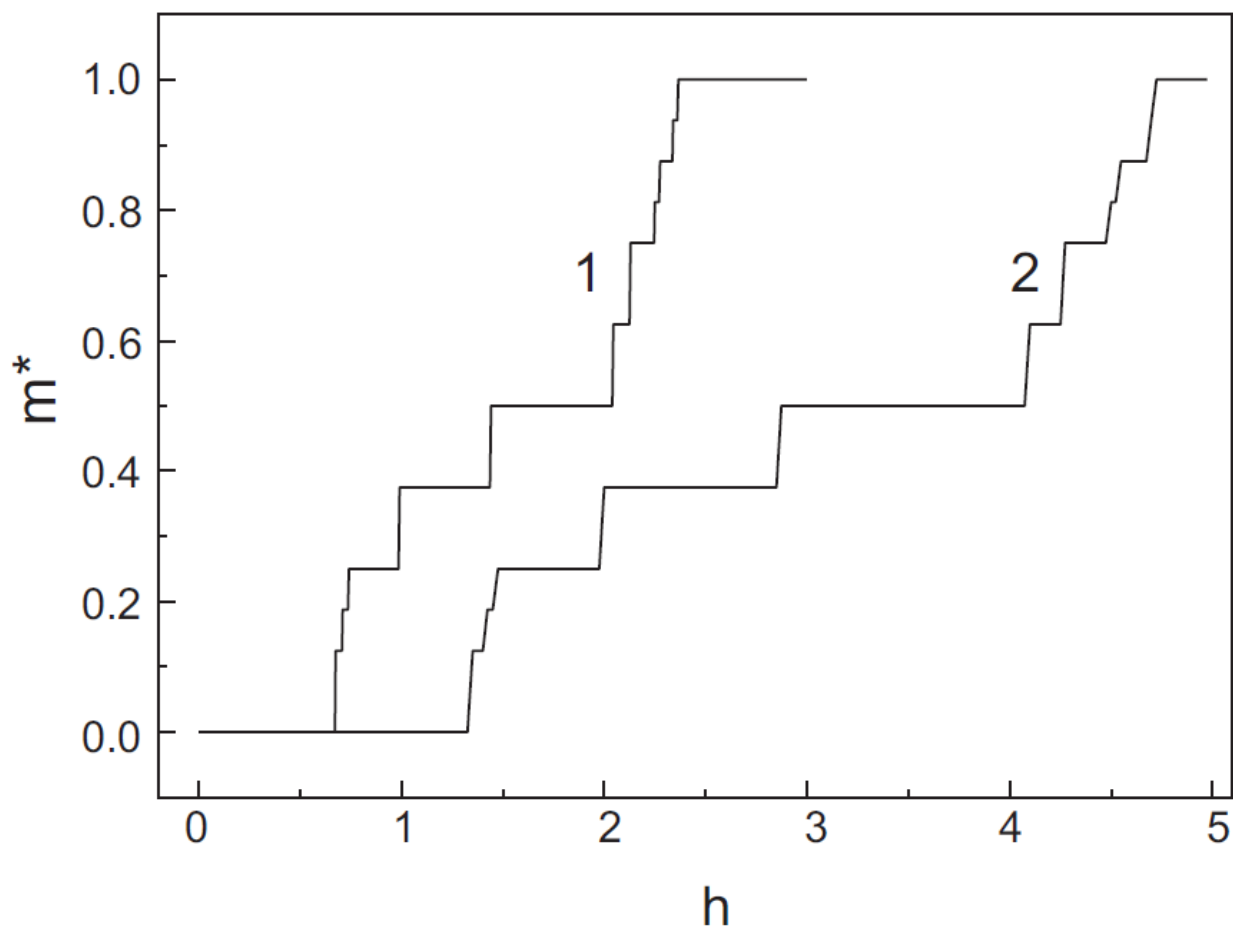


Рис. 4.7 Зависимость приведенной намагниченности m^* от внешнего поля h для случая изотропного обменного воздействия. Зависимость 1 соответствует случаю, когда диагональное взаимодействие отсутствует: $J_z=J_{xx}=1$, $J'_z=J'_{xx}=2$. Зависимость 2 получена при $J_{xx}=1$, $J_z=1.1$, $J'_{xx}=2$, $J'_z=2.1$. Размеры изучаемой системы - 8×4 .

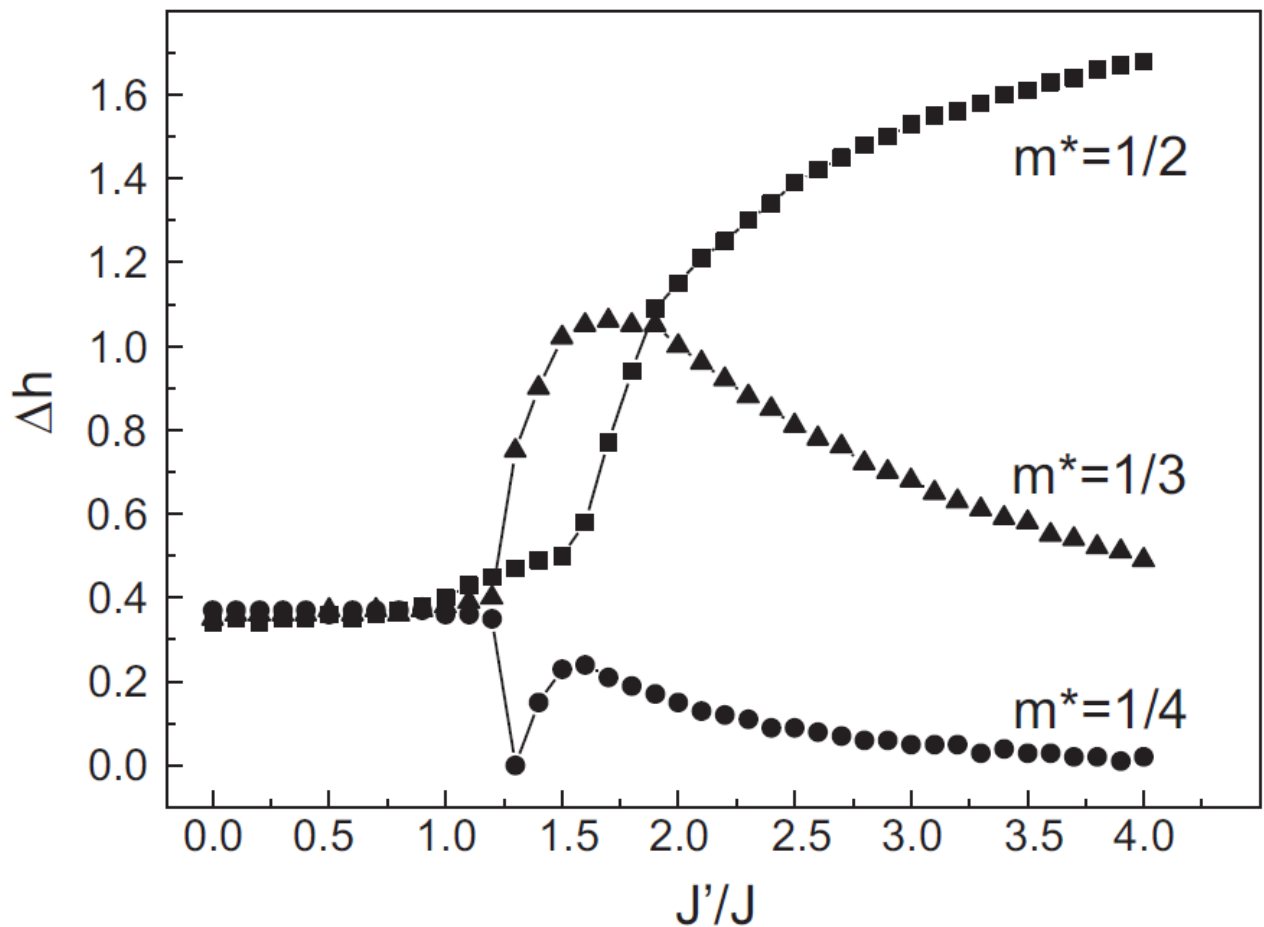


Рис. 4.8 Зависимость ширины плато Δh , соответствующих $m^* = 1/2$ (квадраты), $m^* = 1/3$ (треугольники), и $m^* = 1/4$ (кружки), от параметра $\alpha = J'/J$.

В области $1.8 \lesssim \alpha$ плато $m^* = 1/3$ и $m^* = 1/4$ уменьшаются, и в пределе остается одно плато, соответствующее $m^* = 1/2$. Эту область можно обозначить как область “димерного” антиферромагнетика - газа ортогональных димеров с антиферромагнитным взаимодействием.

Детальную информацию о структуре образующихся фаз могло бы дать изучение свойств корреляционных функций, например, спин-спиновой и димер-димерной. Однако такой анализ является крайне сложным при использовании метода точной диагонализации в силу ограниченности размеров системы. Тем не менее, мы планируем провести такие исследования в ближайшем будущем.

Выводы

Основные результаты данной работы были получены при изучении системы с линейными размерами 8×4 . На рис. 4.6 представлены зависимости приведенной намагниченности m^* от внешнего магнитного поля для случая изотропного обменного взаимодействия: $J_z = J_{xx}$, $J'_z = J'_{xx}$. Зависимость 1 соответствует случаю, когда диагональное взаимодействие отсутствует ($J_z = J_{xx} = 1$, $J'_z = J'_{xx} = 0$). Видно, что все плато (ступени) имеют высоты, равные $2/N$. Исследование систем с различными размерами показало, что высоты и ширины данных плато зависят исключительно от размеров системы и являются следствием ее конечности. Зависимость 2 получена при $J_z = J_{xx} = 1$, $J'_z = J'_{xx} = 2$. В этом случае ширины плато, соответствующих $m^* = 1/2, 1/3, 1/4$, слабо зависят от размеров системы и, следовательно, отражают свойства самой модели. Важно отметить, что в классической изотропной модели Гейзенберга плато отсутствуют (существует лишь особенность, соответствующая $m^* = 1/3$) [1].

Таким образом, установлено, что в рамках классической модели Гейзенберга фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда со взаимодействием ближайших соседей и легкоосной анизотропией зависимость намагниченности от магнитного поля имеет особенность в виде плато « $M = 1/3$ ». Ширина этого плато связана со степенью анизотропии. Показано, что в случае изотропной решетки или анизотропии другого типа плато отсутствует.

Впервые установлено, что зависимость квантовой XXZ -модели со спином $S = 1/2$ на фрустрированной решетке Шастры-Сазерленда имеет особенности в виде ряда плато « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ », которые являются стабильными по отношению к изменению размеров системы. Обнаружено, что эти плато также имеют место в системе с изотропным обменным взаимодействием между спинами.

ВЫВОДЫ

В диссертационной работе решена важная задача в области теоретической физики, а именно: теоретически описана структура основного состояния одномерной системы электронов на неупорядоченной решетке-матрице и обнаружены особенности термодинамических свойств двумерной фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда.

Наиболее существенными оригинальными результатами диссертационной работы являются следующие:

1. Показано, каким образом происходит разрушение трансляционной симметрии электронного газа на неупорядоченной решетке-матрице. Показано, что в случае низкой концентрации частиц основное состояние имеет пространственную структуру, которая эквивалентна структуре различных ферромагнитных доменов, которые случайно чередуются. Установлена аналитическая функция среднего линейного размера домена в зависимости от степени неупорядоченности.
2. Впервые было показано, что процесс туннелирования в двумерной системе электронов высокой плотности над поверхностью жидкого гелия является основным источником динамической неустойчивости фазы вигнеровского кристалла. Установлено, что при низкой концентрации электронов процесс термоактивации дает наибольший вклад в испарение электронов.
3. Установлено, что в рамках классической модели Гейзенберга фрустрированной решетки Шастры-Сазерленда со взаимодействием ближайших соседей и легкоосной анизотропией зависимость намагниченности от магнитного поля имеет особенность в виде плато « $M = 1/3$ ». Ширина этого плато связана со степенью анизотропии.

Показано, что в случае изотропной решетки или анизотропии другого типа плато отсутствует.

4. Впервые установлено, что зависимость квантовой XXZ -модели со спином $S = 1/2$ на фрустрированной решетке Шастры-Сазерленда имеет особенности в виде ряда плато « $M = 1/2, 1/3, 1/4$ », которые являются стабильными по отношению к изменению размеров системы. Обнаружено, что эти плато также имеют место в системе с изотропным обменным взаимодействием между спинами.

СПИСОК ИСПОЛЬЗОВАННЫХ ИСТОЧНИКОВ

1. Slavin V. V. Monte Carlo simulation of anisotropic Shastry–Sutherland lattice in the framework of classical Heisenberg model / V. V. Slavin, **О. О. Kryvchikov** // 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. Кривчиков** // 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, **А. А. 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. Кривчиков** // 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. Кривчиков** // 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. Кривчиков** // 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. Kryvchikov** // 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 **O. O. Kryvchikov** // III Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2012): International Conference for Young Scientists, May 14-18, 2012: book of abstr. – Kharkiv, 2012. – P.168.
9. Славін В. В. Вплив електричного поля на стабільність електронного кристалу над поверхнею рідкого гелію / В. В. Славін, **О. О. Кривчіков** // 12-та Всеукраїнська школа-семинар 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 **O. O. 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 неупорядкованій 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, **O. O. 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, **O. O. Kryvchikov** // VI Low Temperature Physics (ICYS-LTP-2015): International Conference for Young Scientists, June 2-5, 2015: book of abstr. – Kharkiv, 2015. – P.110.
 14. Vannimenus J. Theory of the frustration effect. II. Ising spins on a square lattice / J. Vannimenus and G. Toulouse // J. Phys. C: Solid State Phys. – 1977. – V. 10, № 18. – P. L537– L542.
 15. Lacroix C. Introduction to Frustrated Magnetism: Materials, Experiments, Theory / Eds. Lacroix C., Mendels P., Mila F. – Springer Science & Business Media, 2011. – V. 164. – 682 p.

16. Villain J. Spin glass with non-random interactions / J. Villain // *J. Phys. C: Solid State Phys.* – 1977. – V.10, № 10. – P. 1717–1734.
17. Камилов И. К., Исследование фазовых переходов и критических явлений методами Монте-Карло / И. К. Камилов, А. К. Муртазаев, Х. К. Алиев // *УФН.* – 1999. – Т. 169, №7. – С. 773–795.
18. Доценко В.С. Критические явления в спиновых системах с беспорядком / В.С. Доценко // *УФН.* – 1995. – Т. 165, № 5. – С. 481–528.
19. Бэкстер Р. Точно решаемые модели в статистической механике / Р. Бэкстер, под ред. А.М. Бродского; пер. с англ. Е.П. Вольского, Л.И. Дайхина. – Москва: Мир, 1985. – 486 с.
20. Sherrington D. Solvable Model of a Spin-Glass / D. Sherrington, S. Kirkpatrick // *Phys. Rev. Lett.* – 1975. – V. 35, № 26. – P. 1792–1795.
21. Wannier G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net / G. H. Wannier // *Phys. Rev.* – 1950. – V. 79, № 2. – P. 357–364.
22. Grechnev A. Exact ground state of the Shastry-Sutherland lattice with classical Heisenberg spins / A. Grechnev // *Phys. Rev. B.* – 2013 – V. 87, № 14. – P.144419-1–144419-10.
23. Shastry S. Exact ground state of a quantum mechanical antiferromagnet / S. Shastry, B. Sutherland // *Physica B+C.* – 1981. – V. 108, № 1-3. – P. 1069–1070.
24. Lieb Elliott H. Exact Solution of the F Model of An Antiferroelectric / E. H. Lieb // *Phys. Rev. Lett.* – 1967. – V. 18, № 24. – P. 1046–1049.
25. Lieb Elliott H. Exact Solution of the Problem of the Entropy of Two-Dimensional Ice / E. H. Lieb // *Phys. Rev. Lett.* – 1967. – V. 18, № 17. – P. 692–694.
26. Lieb E. H. Exact Solution of the Two-Dimensional Slater KDP Model of a Ferroelectric / E.H. Lieb // *Phys. Rev. Lett.* – 1967. – V. 19, № 3. – P. 108–110.
27. Sutherland B. Exact Solution of a Two-Dimensional Model for Hydrogen-Bonded Crystals / B. Sutherland // *Phys. Rev. Lett.* – 1967. – V. 19, № 3. – P. 103–104.

28. Yang C. P. Exact Solution of a Model of Two-Dimensional Ferroelectrics in an Arbitrary External Electric Field / C. P. Yang // *Phys. Rev. Lett.* – 1967. – V. 19, № 10. – P. 586–588.
29. Nagle J.F. Proof of the first order phase transition in the Slater KDP model / J.F. Nagle // *Comm. Math. Phys.* – 1969. – V. 13, № 1. – P. 62–67.
30. Critical behavior of the antiferromagnetic Heisenberg model on a stacked triangular lattice / T. Bhattacharya, A. Billoire, F. Delduc et al. // *J. Physique.* – 1994. – V. 4, № 2. – P. 181–186.
31. Binder K. Monte Carlo tests of renormalization-group predictions for critical phenomena in Ising models / K. Binder, E. Luijten // *Phys. Reports.* – 2001. – V. 344, № 4-6. – P.179–253.
32. Landau D.P. Computer simulation studies of critical phenomena / D. P. Landau// *Physica A.* – 1994. – V. 205. – P.41 – 64.
33. Биндер К. Методы Монте-Карло в статистической физике / К. Биндер; под ред. Г.И. Марчука, пер. с англ. В.Н. Новикова, К.К. Сабельфельда, Г.А. Михайлова. – Москва: Мир, 1982. – 400 с.
34. Holm C. Critical exponents of the classical three-dimensional Heisenberg model: A single-cluster Monte Carlo study / C. Holm, W. Janke // *Phys. Rev. B.* – 1993. – V.48, № 2. – P.936–950.
35. Cullen J. J. Monte Carlo studies of one-dimensional quantum Heisenberg and XY Models / J. J. Cullen, D. P. Landau // *Phys. Rev. B.* – 1983. – V.27, № 1. – P.297–313.
36. Nonomura Y. New Quantum Monte Carlo Approach to Ground-State Phase Transition in Quantum Spin Systems / Y. Nonomura // *Jour. Phys. Soc. Jap.* – 1998. – V.67, № 1. – P.5–7.
37. Крокстон К. Физика жидкого состояния / К. Крокстон; под ред. А.И. Осипова, пер. с англ. А.Г. Башкирова, И.В. Вдовиченко. – Москва: Мир, 1978. – 400 с.

38. Вуд В.В. Исследование моделей простых жидкостей методом Монте-Карло. Физика простых жидкостей / Вуд В.В. – Москва: Мир, 1978. – 120 с.
39. Ермаков С. М. Статистическое моделирование / С. М. Ермаков, Г.А. Михайлов. – Москва: Наука, 1982. – 296 с.
40. Кузьмин Е.В. Физика магнитоупорядоченных веществ / Е.В. Кузьмин, Е.А. Петраковский, Э.А. Завадский. – Новосибирск: Наука, 1976. – 287 с.
41. Займан Дж. Модели беспорядка. Теоретическая физика однородно неупорядоченных систем / Дж. Заман; пер. с англ. – Москва: Мир, 1982. – 592 с.
42. Кузьмин Е. В. Проблема сосуществования магнетизма и сверхпроводимости / Кузьмин Е. В., Овчинников С. Г. // Ученые записки Таврического национального университета им. В.И. Вернадского. Серия: Физика. – 2009. – Т. 22, №. 61. – С. 18–25.
43. Edwards S. F. Theory of spin glasses / S. F. Edwards, P.W. Anderson // J. Phys. F.: Met. Phys. – 1975. – V.5, № 5. – P.965–974.
44. Cannella V. Magnetic Ordering in Gold-Iron Alloys / V. Cannella, J.A. Mydosh // Phys. Rev. B. – 1972. – V.6, № 11. – P.4220–4237.
45. De Almeida J. R. L. Stability of the Sherrington-Kirkpatrick solution of a spin glass model / J. R. L. De Almeida, D. J. Thouless // J. Phys. A. –1978. – V. 11, № 5. – P. 983–990.
46. Parisi G. On the mean field approach to glassy systems / G. Parisi // arXiv preprint cond-mat / 9701034. –1997. – P. 1–10.
47. Franz S. Local spin glass order in 1D / S. Franz and G. Parisi // EPL (Europhysics Letters). – 2006. – V.75, №3. – P.385–391.
48. Franz S. Spin glass models with Kac interactions / S. Franz // The European Physical Journal B. – 2008. – V. 64, № 3. – P. 557–561.
49. Mermin N.D. Absence of Ferromagnetism or Antiferromagnetism in One- or Two-Dimensional Isotropic Heisenberg Models / N.D. Mermin, H. Wagner // Phys. Rev. Lett. – 1966. – V.17, №22. – P. 1133–1136.

50. Slavin V. V. Thermodynamics of a one-dimensional lattice system with long-range interelectron repulsion / V. V. Slavin and A. A. Slutskin // *Phys. Rev. B.* – 1996. – V.54, №11. – P.8095–8101.
51. Imry Y. Random-Field Instability of the Ordered State of Continuous Symmetry / Y. Imry, S. K. Ma // *Phys. Rev. Lett.* – 1966. – V.35, № 21. – P. 1399–1402.
52. Fisher D. S. The Ising model in a random magnetic field / D. S. Fisher, J. Fröhlich, T. Spencer // *Journal of Statistical Physics.* – 1984. – V.34, № 5/6. – P.864 – 870.
53. Hubbard J. Generalized Wigner lattices in one dimension and some applications totetracyanoquinodimethane (TCNQ) salts / J. Hubbard // *Phys. Rev. B.* – 1977. – V.17, № 2. – P. 494–506.
54. Бурков С. Е. Фазовые диаграммы одномерных решетчатых моделей с дальнедействующим антиферромагнитным взаимодействием / С. Е. Бурков, Я. Г. Синай // *Успехи математических наук.* – 1983. – Т.38, № 4. – С. 205–225.
55. Bak P. One-dimensional Ising model and the complete devil's staircase / P. Bak and R. Bruinsma // *Phys. Rev. Lett.* – 1982. – V. 49, № 4. – P. 249–252.
56. Jędrzejewski J. Devil's staircase for nonconvex interactions / J. Jędrzejewski and J. Miekisz // *EPL (Europhysics Letters).* – 2000. – V. 50, № 3. – P. 307–311.
57. Slavin V. V. Low-temperature thermodynamics of one-dimensional Wigner glass on a highly disordered host lattice / V.V. Slavin, A.A. Slutskin // *Physica B: Condensed Matter.* – 2005. –V. 364, № 1–4. – P. 321–327.
58. Slavin V. Low-temperature thermodynamic properties of one-dimensional disordered electron lattice system / V. Slavin // *Phys. Stat. Sol. (b).* – 2004. – V. 241, №13. – P. 2928–2937.
59. Slavin V. V. Thermodynamics of a one-dimensional generalized Wigner crystal / V. V. Slavin // *Low Temp. Phys.* – 2003. – V. 29, № 8. – P. 674–679.
60. Slavin V. Low-energy spectrum of one-dimensional generalized Wigner lattice / V. Slavin // *Phys. Stat. Sol. (b).* – 2005. – V. 242, №10. – P. 2033–2040.

61. Slavin V. Numerical studies of one - dimensional generalized Wigner crystal on disordered host-lattice / V. Slavin // Intern. Journ. of Mod. Phys. C. – 2004. – V. 15, №7. – P. 955–967.
62. Burnell F. J. The devil's staircase in 1-dimensional dipolar Bose gases in optical lattices / F. J. Burnell // arXiv preprint arXiv:1004.5595. – 2010. – P.1–39.
63. Slavin V. V. Low-temperature thermodynamics of two-dimensional electron gas on disordered host lattice / V. V. Slavin // Low Temperature Physics. – 2009. – V.35, №3. – P. 149–155.
64. Slavin V.V. Monte Carlo simulation of a two-dimensional electron gas on a disordered host-lattice / V.V. Slavin // Low Temperature Physics. – 2010. – V. 36, №3. – P. 243–250.
65. Шикин В.Б Двумерные заряженные системы в гелии / В.Б. Шикин, Ю.П.Монарха. – Наука. Гл. ред. физ.-мат. лит, 1989. –155 с.
66. Monarkha Yu. P. Two-Dimensional Coulomb Liquids and Solids / Yu. P. Monarkha and K. Kono. – Berlin: Springer Science & Business Media, 2004. – 349 p.
67. Williams R. Surface States of Electrons on Liquid Helium / R. Williams, R. S. Crandall, and A. H. Willis // Phys. Rev. Lett. – 1971. – V. 26, № 1. –P.7–10.
68. Grimes C.C. Structure of the electron gas at the surface of liquid helium / C.C. Grimes // J. Phys. Colloques. – 1978. – V.39, № C6. –P.1352–1359.
69. Grimes C. C. Evidence for a Liquid-to-Crystal Phase Transition in a Classical, Two-Dimensional Sheet of Electrons / C. C. Grimes, G. A. Adams // Phys. Rev. Lett. – 1979. – V.42, №12. – P.795–798.
70. Kosterlits J. M. Ordering, metastability and phase transitions in two-dimensional systems / J. M. Kosterlits and D. J. Thouless // Journal of Physics C: Solid State Physics. – 1973. – V. 6, № 7. – P.1181–1203.
71. Вильк Ю. М. Микроструктура электрического поля и энергия связи поверхностных электронов в гелии при наличии ближнего порядка / Ю. М. Вильк, Ю. П. Монарха // ФНТ. – 1987. – Т. 13, № 7. – С. 684–694.

72. Сивоконь В.Е. Особенности проводимости 2D электронного кристалла над жидким гелием в сильных ведущих полях / В.Е. Сивоконь, К.А. Наседкин, А.С. Неонета // ФНТ. – 2008. – Т.34, № 8. – С. 761–767.
73. Wannier G. H. Antiferromagnetism. The Triangular Ising Net / G. H. Wannier // Phys. Rev. – 1950. – V. 79, № 2. – P. 357–365.
74. Ranjbar S. Investigation of Two-Dimensional Triangular Ising Lattice in the Absence and Presence of a Magnetic Field / S. Ranjbar // Chinese Journal of Physics. – 2003. – V. 41. – P.383 – 398.
75. Kim Seung-Yeon. Triangular-lattice Ising Model in a Nonzero Magnetic Field / Seung-Yeon Kim // Journal of the Korean Phys. Soc. – 2011. – V. 58, № 1. – P. 5–8.
76. Qian Xiaofeng. The triangular Ising model with nearest- and next-nearest-neighbor couplings in a field / Xiaofeng Qian and Henk W. J. Blote // Phys. Rev. E. – 2004. – V. 70, № 3. – P.036112-1–036112-27.
77. Smith R.W. Synthesis, structure, and properties of the orthoborate $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / R. W. Smith, D. A. Keszler // J. Solid State Chem. – 1991. – V. 93, № 2. – P. 430–435.
78. Exact Dimer Ground State and Quantized Magnetization Plateaus in the Two-Dimensional Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern et al. // Phys. Rev. Lett. – 1999. – V. 82, № 15. – P. 3168–3172.
79. High-field Magnetization of TbB_4 / S. Yoshii, T. Yamamoto, M. Hagiwara et al. // Journ. of Magn. and Magn. Materials. – 2007. – V. 310, № 2. – P. 1282–1284.
80. Highly anisotropic magnetic phase diagram of a 2-dimensional orthogonal dimer system TmB_4 / F. Iga, A. Shigekawa, Y. Hasegawa et al. // Journ. of Magn. and Magn. Materials. – 2007. – V.310, № 2. – P.e443–e445.
81. Magnetic frustrations in the Shastry–Sutherland system ErB_4 / S. Michimura, A. Shigekawa, F. Iga et al. // Physica B. – 2006. – V. 378. – P. 596–597.
82. Multiple Metamagnetic Transitions in Antiferromagnet $\text{Yb}_2\text{Pt}_2\text{Pb}$ with the Shastry–Sutherland Lattice / K. Iwakawa, Y. Hirose, K. Enoki et al. // Journal J. Phys. Soc. Jpn. – 2012. – V. 81, № Suppl. B. – P.SB058-1– SB058-4.

83. Okamoto K. Fluid-dimer critical point in $S = 1/2$ antiferromagnetic Heisenberg chain with next nearest neighbor interactions / K. Okamoto, K. Nomura // *Physics Letters A.* – 1992. – V. 169, № 6. – P. 433–437.
84. Exact Dimer Ground State and Quantized Magnetization Plateaus in the Two-Dimensional Spin System $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / H. Kageyama, K. Yoshimura, R. Stern et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 1999. – V. 82, № 15. – P. 3168–3172.
85. Dublennykh Yu.I. Ground States of the Ising Model on the Shastry-Sutherland Lattice and the Origin of the Fractional Magnetization Plateaus in Rare-Earth-Metal Tetraborides / Yu. I. Dublennykh // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109, № 16. – P. 167202-1–167202-5.
86. Che Chang Ming. Magnetization plateau of the classical Ising model on the Shastry-Sutherland lattice: A tensor renormalization-group approach / Ming-Che Chang and Min-Fong Yang // *Phys. Rev. B.* – 2009. – V. 79, № 10. – P. 104411-1–104411-7.
87. Magnetization Process of the Classical Heisenberg Model on the Shastry-Sutherland Lattice / M. Moliner, D. C. Cabra, A. Honecker et al. // *Phys. Rev. B* – 2009. – V. 79, № 14. – P. 144401-1–144401-9.
88. Magnetization plateaus in the classical Shastry-Sutherland lattice / M. Moliner, D. C. Cabra, A. Honecker et al. // *Journ. of Phys.: Conference Series.* – 2009. – V. 145, № 1. – P. 012053-1–012053-4.
89. Magnetic behaviors of classical spin model on the Shastry-Sutherland lattice: Monte Carlo simulation / M. H. Qin, G. Q. Zhang, K. F. Wang et al. // *J. Appl. Phys.* – 2011. – V. 109, № 7. – P. 07E103-1–07E103-3.
90. Multi-step magnetization of the Ising model on a Shastry-Sutherland lattice: a Monte Carlo simulation / W. C. Huang, L. Huo, G. Tian et al. // *Journ. of Phys.: Cond. Mat.* – 2012. – V. 24, № 38. – P. 386003-1–386003-6.
91. Farkasovsky P. Numerical study of magnetization processes in rare-earth tetraborides / P. Farkasovsky, H. Cencarikova and S. Mata // *Phys. Rev. B.* – 2010. – V. 82, № 5. – P. 054409-1–054409-5.

92. Jolicoeur Th. Magnetization Process from Chern-Simons Theory and Its Application to $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / Th. Jolicoeur, G. Misguich and S. M. Girvin // *Progr. of Theor. Phys. Supp.* – 2002. – № 145. – P. 76–84.
93. Corboz P. Tensor network study of the Shastry-Sutherland model in zero magnetic field / Corboz P. and Mila F. // *Phys. Rev. B.* – 2013. – V. 87, № 11. – P.115144-1–115144-11.
94. Corboz P. Crystals of Bound States in the Magnetization Plateaus of the Shastry-Sutherland Model / Corboz P. and Mila F. // *Phys. Rev. Lett.* – 2014. – V. 112, № 14. – P. 147203-1–147203-5.
95. Mott N. F. The Basis of the Electron Theory of Metals, with Special Reference to the Transition Metals / N. F. Mott // *Proc. of the Phys. Soc. Sec. A.* – 1949. – V.62, № 7. – P.416–422.
96. Елесин В. Ф. Физика фазовых переходов / В. Ф. Елесин, В.А. Кашурников. – Москва: МИФИ, 1997. – 177 с.
97. Lieb E. H. Absence of Mott Transition in an Exact Solution of the Short-Range, One-Band Model in One Dimension / E.H. Lieb and F. Y. Wu // *Phys. Rev. Lett.* – 1968. – V.20, № 25. – P.1445–1449.
98. Valenzuela B. Charge and spin order in one-dimensional electron systems with long-range Coulomb Interactions / B. Valenzuela, S. Fratini, D. Baeriswyl // *Phys. Rev. B.* – 2003. – V. 68, № 4. – P.045112-1–045112-11.
99. Fratini S. Variational Wave Function for Generalized Wigner Lattices in One Dimension / S. Fratini, B. Valenzuela and D. Baeriswyl // *Journal de Physique IV (Proceedings)*. – EDP sciences, 2002. – V. 12, № 9. – P. 69–72.
100. Extended Gutzwiller wave function for the Hubbard-Holstein model / P. Barone, R. Raimondi, M. Capone et al. // *EPL (Europhysics Letters)*. – 2007. – V. 79, № 4. – P.47003-1– 47003-5.
101. Hong-Yu Yang. Variational study of the one dimensional $t - J$ model: a unified description of the ground state phase diagram / Hong-Yu Yang, Tao Li // *Journ. of Phys.: Cond. Matter.* – 2007. – V. 19, №18. – P.186218-1–186218-1.

102. Smith R.W. Synthesis, structure, and properties of the orthoborate $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ / R. W. Smith, D. A. Keszler // *J. Solid State Chem.* – 1991. – V. 93, № 2. – P. 430–345.
103. Cullum J. K. Lanczos Algorithms for Large Symmetric Eigenvalue Computations: Vol. 1: Theory / J.K. Cullum, R. A. Willoughby. – Soc. for Ind. and Appl. Math. – 2002. – V. 41. –294 p.
104. Fractalization drives crystalline states in a frustrated spin system / S.E. Sebastian, N. Harrison, P. Sengupta et al.// *Proceedings of the National Academy of Sciences.* – 2008. – V. 105, №. 51. – P. 20157–20160.
105. Laeuchli A. Phase diagram of the quadrumerized Shastry-Sutherland model / A.Laeuchli, S. Wessel, M Sigris // *Phys. Rev. B.* –2002. – V. 66, № 1.– P. 014401-1– 014401-7.
106. Anisotropic Cascade of Field-Induced Phase Transitions in the Frustrated Spin-Ladder System BiCu_2PO_6 / Y. Kohama, S. Wang, A. Uchida et al. // *Phys. Rev. Lett.* – 2012. – V. 109, № 16. –P. 167204-1–167204-5.
107. A. A. Zvyagin. New physics in frustrated magnets: Spin ices, monopoles, etc. / A.A. Zvyagin // *Low Temp. Phys.* – 2013. –V. 39, № 11. – P. 901–970.
108. Муртазаев А. К. Фрустрированный антиферромагнетик Гейзенберга на треугольной решетке с взаимодействием вторых ближайших соседей / А. К. Муртазаев, М. К. Рамазанов, М. К. Бадиев // *Известия Российской Академии Наук. Серия физическая.* – 2010. – Т.74, № 8. – С.1189–1191.
109. Exact ground states of a spin-12 Ising-Heisenberg model on the Shastry-Sutherland lattice in a magnetic field / T. Verkholyak, J. Strečka, F. Mila et al. // *Phys. Rev. B.* – 2014. – V. 90, № 13. – P. 134413-1–134413-15.