

УДК 539.192

ЭФФЕКТИВНЫЕ СПИНОВЫЕ ГАМИЛЬТОНИАНЫ В ТЕОРИИ НИЗКОРАЗМЕРНЫХ МАГНЕТИКОВ

©2004 В.О. Черановский



Черановский Владислав Олегович. Химик, доктор физико-математических наук, кандидат химических наук. Докторская диссертация: "Эффективные спиновые гамильтонианы в теории сильно коррелированных многоэлектронных систем" (1994 год). Родился в 1955 году в Харькове. В 1977 году окончил химический факультет Харьковского государственного университета по специальности органическая химия. В 1977-1981 годах учился в аспирантуре Московского Института Тонкой Химической Технологии. С 1981 года по настоящее время работает в Харьковском университете. В 1992 году стажировался в Техасском университете (Гальвестон, США), в 1997, 2000 и 2004 годах стажировка и преподавание в Техническом университете Среднего Востока (Анкара, Турция). В настоящее время – профессор кафедры теоретической химии, ведущий научный сотрудник НИИ Химии. Основные научные интересы: электронное строение и магнитные свойства сильно коррелированных многоэлектронных систем (в частности, углеродных и неуглеродных нанотрубок), термодинамика низкоразмерных квантовых и классических решеточных моделей.

1. ВВЕДЕНИЕ
2. МОДЕЛЬ ГЕЙЗЕНБЕРГА
3. МОДЕЛЬ ИЗИНГА
4. ХУ И ХХZ-МОДЕЛИ
5. МОДЕЛЬ ХАББАРДА С БЕСКОНЕЧНЫМ ОТТАЛКИВАНИЕМ

Резюме. Электронная корреляция часто проявляется нетривиальным образом в одномерных магнитных системах типа лестничных соединений переходных металлов и сопряженных полимеров. Поэтому теоретическое моделирование подобных объектов требует использования многоэлектронных методов. В настоящем обзоре кратко рассмотрено применение эффективных спиновых гамильтонианов к изучению низкоэнергетических состояний одномерных магнетиков. Особое внимание уделено свойствам точного энергетического спектра соответствующих моделей. Также приведены результаты численного моделирования термодинамики двумерной модели Изинга с конкурирующими взаимодействиями и построена часть фазовой диаграммы модели.



1. Введение

Магнитные свойства кристаллических твердых тел, имеющих одномерные или двумерные магнитные подрешетки (KCuF_3 , $\text{La}_2\text{Cu}_2\text{O}_5$, NH_4CuCl_3 и др.), в значительной мере определяются взаимодействием электронов, т.е. электронной корреляцией [1-3]. Во многих случаях подобные объекты не удастся рассматривать как частный случай обычных трехмерных систем. Это существенно затрудняет теоретическое описание свойств таких низкоразмерных магнетиков традиционными методами квантовой химии твердого тела [1-3]. Моделирование свойств магнетиков на основе строгих многоэлектронных подходов сопряжено с большими вычислительными трудностями и в значительной мере ограничено современным состоянием теории и возможностями доступных компьютеров. Успехи в изучении квазиодномерных и квазидвумерных магнетиков на основе соединений переходных металлов во многом обусловлены применением упрощенных многоэлектронных подходов с использованием моделей Гейзенберга и Хаббарда [1,2]. Гамильтонианы этих моделей имеют довольно простую алгебраическую структуру. Это позволило доказать ряд теорем о характере точного энергетического спектра моделей и спиновой структуре основного состояния, которые имеют большое значение для тестирования результатов численного моделирования [4,5]. С другой стороны, как показывает практика, основные заключения о магнитной структуре, полученные в рамках этих упрощенных моделей, как правило, сохраняются и при переходе к более строгим методам, например, учитывающим отталкивание электронов, расположенных на несоседних узлах кристаллической решетки [1,4].

Многоэлектронные модели Хаббарда и Гейзенберга тесно связаны между собой. Гамильтониан модели Хаббарда имеет вид:

$$\mathbf{H} = \sum_{i,j,\sigma} t_{ij} (\mathbf{a}_{i\sigma}^+ \mathbf{a}_{j\sigma} + \mathbf{a}_{j\sigma}^+ \mathbf{a}_{i\sigma}) + U \sum_i \mathbf{a}_{i\sigma}^+ \mathbf{a}_{i\sigma} \mathbf{a}_{i-\sigma}^+ \mathbf{a}_{i-\sigma}. \quad (1)$$

Здесь t_{ij} – резонансный интеграл для химической связи между узлами решетки с номерами i и j , U – энергия кулоновского отталкивания электронов, расположенных на одном узле, $\mathbf{a}_{i\sigma}^+$ – оператор рождения электрона с проекцией спина σ на i -ом узле решетки ($\sigma = \pm 1/2$).

Обычно наибольший интерес представляет нижняя часть спектра гамильтониана Хаббарда: основное состояние и низкоэнергетические возбуждения. При сильном кулоновском отталкивании, когда $U \gg \max(t_{ij})$, описание этих состояний можно значительно упростить, применяя теорию возмущений и формализм спиновых операторов.

Рассмотрим сначала решетку, для которой число электронов совпадает с числом узлов. В этом случае при сильном отталкивании распределение электронов по узлам решетки, для которого на каждый узел приходится ровно по одному электрону, отвечает минимальной энергии. Для молекул такое распределение называется гомеополярным или неполярным ковалентным состоянием. Ненулевые резонансные интегралы в гамильтониане (1) приводят к перескокам электронов между соседними узлами. Описывая эти перескоки с помощью теории возмущений, можно показать, что во втором порядке по резонансным интегралам гамильтониан Хаббарда сводится к гейзенберговскому спиновому гамильтониану, который формально эквивалентен гамильтониану метода валентных связей в пространстве ковалентных состояний.

$$\mathbf{H} = \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad J_{ij} = \frac{4t_{ij}^2}{U} \geq 0, \quad (2)$$

где \mathbf{S}_i – одноэлектронный спиновый оператор определенный на i -ом узле кристаллической решетки. ($\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = \mathbf{S}_i^x \cdot \mathbf{S}_j^x + \mathbf{S}_i^y \cdot \mathbf{S}_j^y + \mathbf{S}_i^z \cdot \mathbf{S}_j^z$); J_{ij} – эффективный обменный интеграл, описывающий взаимодействие между узлами с номерами i и j .

Гейзенберговский спиновый гамильтониан адекватно описывает магнитные свойства целого ряда соединений переходных элементов с локализованными носителями магнитных моментов, например, меднооксидных керамик.

Для сопряженных углеводов $U \sim \max(t_{ij})$ и необходимо учитывать влияние более высоких порядков теории возмущений. При этом получают обобщенные эффективные спиновые гамильтонианы, действующие в пространстве ковалентных состояний [6]. Эти гамильтонианы содержат дополнительные члены, имеющие вид произведений спиновых транспозиций, и перенормированные обменные параметры. Для альтернантных сопряженных молекул наиболее важными оказываются дополнительные члены, которые могут быть выражены через операторы циклических спиновых перестановок. Соответствующие эффективные спиновые гамильтонианы были успешно применены для изучения проблемы ароматичности [7,8].

Размерность пространства ковалентных состояний значительно меньше размерности полного пространства, в котором определена модель Хаббарда, так как последнее дополнительно включает ионные состояния. В этом заключается одна из причин популярности спиновых гамильтонианов для моделирования низко лежащих энергетических состояний соединений переходных металлов и сопряженных органических молекул. В химии такой подход оказался особенно эффективным для предсказания спиновой мультиплетности основного состояния некекулевских сопряженных углеводов [4,9] а также для моделирования магнитных свойств органических и металлоорганических соединений переходных металлов, имеющих магнитную подрешетку квазиодномерного характера [1,10].

К гейзенберговской спиновой модели тесно примыкают различные анизотропные спиновые модели, такие как модель Изинга, XY- и XXZ- модели для спина $S = 1/2$. Первая модель является наиболее простой. Ее можно получить из гейзенберговской спиновой модели, учитывая только z-z компоненту скалярного произведения узельных спиновых операторов S_i ,

$$\mathbf{H}_{\text{Изинга}} = \sum_{i < j} J_{ij} \mathbf{S}_i^z \cdot \mathbf{S}_j^z \quad (3)$$

Так как гамильтониан модели не перемешивает различные спиновые конфигурации (наборы спиновых переменных σ_i), то определение энергетического спектра модели сводится к простому подсчету парных взаимодействий между узлами кристаллической решетки. Если спины, определенные на взаимодействующих узлах решетки с номерами i и j , имеют одинаковое направление, то вклад в полную энергию равен $0.25J_{ij}$. Если направления этих спинов противоположны, соответствующий вклад равен $-0.25J_{ij}$. Очевидно, что полный спектр гамильто-

ниана Изинга состоит из 2^N состояний (N – число узлов решетки). Это делает точный расчет функции распределения модели Изинга сложной комбинаторной задачей, имеющей аналитическое решение только в ограниченном числе случаев. Так, модель Изинга получила широкую известность после появления точного решения Онзагера для двумерной прямоугольной решетки [11], показавшего существование в такой двумерной модели фазового перехода второго рода и ограниченность традиционного термодинамического описания такого перехода в рамках приближения молекулярного поля. В настоящее время модель Изинга с конкурирующими взаимодействиями используется для описания термодинамики объектов, зачастую относящихся к различным областям науки, например, соединений редкоземельных элементов и микроэмульсий [12-14]. Кроме того, двумерная модель Изинга при специальном выборе параметров сводится к одномерным квантовым спиновым моделям [14].

В гамильтониане XY-модели учитываются только x-x и y-y- взаимодействия спинов, а z-z взаимодействия отбрасываются. XXZ-модель отличается от гейзенберговской модели тем, что обменные интегралы при x-x и y-y компонентах не равны интегралам при z-z компонентах

$$\mathbf{H}_{\text{XXZ}} = \sum_{i < j} [J_{ij} (\mathbf{S}_i^x \cdot \mathbf{S}_j^x + \mathbf{S}_i^y \cdot \mathbf{S}_j^y) + J'_{ij} \mathbf{S}_i^z \cdot \mathbf{S}_j^z], \quad J_{ij} \neq J'_{ij} \quad (4)$$

Для случая XY модели в (4) нужно положить $J'_{ij} = 0$.

Такая анизотропия появляется в реальных магнитных материалах из-за влияния кристаллического окружения на магнитную подрешетку. Кроме того, спиновая анизотропия эффективно

возникает в приближении Хартри-Фока для спинового гамильтониана (2) [15-17]. Анизотропные спиновые решетки лестничного типа также интересны тем, что ряде случаев сводятся к одномерным фермионным моделям, таким как гамильтониан Хаббарда.

Если число электронов отлично от числа узлов, рассмотрение взаимодействия узлов решетки в рамках теории возмущений становится довольно громоздким. Поэтому мы ограничимся более простым случаем бесконечного кулоновского отталкивания. С этим предельным случаем связана известная теорема о ферромагнитном характере основного состояния ряда решеток с числом электронов на единицу меньшим числа узлов (теорема Нагаоки) [18]. Вопрос о спине основного состояния при произвольном электронном заполнении остается открытым даже для простых решеток, описываемых моделью Хаббарда с бесконечным отталкиванием.

В моделях Гейзенберга и Хаббарда для низкоразмерных магнетиков особенно сильно и зачастую нетривиальным образом проявляются эффекты электронной корреляции. В ряде случаев модель Хаббарда может быть переформулирована на языке спиновых операторов, что позволяет изучать обе модели в рамках общего математического аппарата.

В настоящей работе этот аппарат будет проиллюстрирован на ряде примеров, представляющих интерес для моделирования физико-химических характеристик новых квазиодномерных магнитных материалов.

2. Модель Гейзенберга

Рассмотрим спиновую цепочку, все спины которой могут быть разбиты на две группы (подрешетки) таким образом, что взаимодействуют только спины из разных групп. Такие спиновые системы будем называть альтернантными аналогично определению альтернантности для моделей Хюккеля и Хаббарда. Согласно теореме Либа-Овчинникова [4,9], основное состояние альтернантной спиновой цепочки невырожденное. Это позволяет обобщить вариационный анализ спектра однородной спиновой цепочки, предложенный Либом и Маттисом [19], на случай альтернантных спиновых цепочек с нечетным числом спинов в элементарном звене и показать, что бесконечные цепочки такого типа не имеют щели в точном спектре возбуждений [20].

Пусть регулярная альтернантная спиновая цепочка описывается гейзенберговским спиновым гамильтонианом \mathbf{H} (2). Занумеруем все спины последовательно по элементарным звеньям вдоль цепочки и будем считать обменные интегралы цепочки параметрами теории, принимающими только положительные значения. Вследствие трансляционной симметрии регулярной цепочки существует унитарный оператор \mathbf{U} , сдвигающий все спины цепочки на одно элементарное звено

$$\mathbf{U} \mathbf{S}_i \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{S}_{i+l}, \quad \mathbf{H} \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{H}, \quad \mathbf{S}^2 \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{S}^2, \quad \mathbf{S}^z \mathbf{U} = \mathbf{U} \mathbf{S}^z, \quad (5)$$

где l – число спинов в элементарном звене, $\mathbf{S}^2, \mathbf{S}^z$ – операторы квадрата полного спина цепочки и z - проекции этого спина соответственно.

Пусть $|\Phi_0(M)\rangle$ – основное состояние цепочки с энергией E_0 и значением z - проекции полного спина M . Тогда

$$\mathbf{U} |\Phi_0(M)\rangle = \exp(i\alpha) |\Phi_0(M)\rangle, \quad (6)$$

где α – некоторое действительное число.

Введем теперь новое состояние $|\Psi_k(M)\rangle$

$$|\Psi_k(M)\rangle = \exp\left(ik \sum_{m=1}^N \mathbf{S}_m^z\right) |\Phi_0(M)\rangle = \mathbf{Q}_k |\Phi_0(M)\rangle \quad (7)$$

где N – полное число спинов цепочки, k – действительное число.

Очевидно, что новое состояние имеет то же значение M , что и основное состояние. Покажем теперь, что новое состояние ортогонально основному состоянию при подходящем выборе чисел k и M . Для этого оценим величину скалярного произведения этих двух функций.

$$\langle \Phi_0(M) | \Psi_k(M) \rangle = \langle \Phi_0(M) | \mathbf{Q}_k | \Phi_0(M) \rangle = \langle \Phi_0(M) | \mathbf{U} \mathbf{Q}_k \mathbf{U}^{-1} | \Phi_0(M) \rangle.$$

Используя введенное определение оператора сдвига, получим

$$\mathbf{U} \mathbf{Q}_k \mathbf{U}^{-1} = \mathbf{Q}_k \exp\left(ikN \sum_{m=1}^l \mathbf{S}_m^z\right) \exp(iklM). \quad (8)$$

Пусть $k = \frac{2\pi}{N}$. Тогда при нечетных l

$$\exp\left(ikN \sum_{m=1}^l \mathbf{S}_m^z\right) = -1.$$

Следовательно,

$$\langle \Phi_0(M) | \Psi_k(M) \rangle = \langle \Phi_0(M) | \Psi_k(M) \rangle \exp\left(i \frac{2\pi l M}{N}\right) \quad (9)$$

Так как энергия основного состояния гамильтониана (2) не зависит от M , то это квантовое число всегда можно выбрать минимальным (0 или 0.5 в зависимости от четности N). Поэтому условие (9) эквивалентно условию строгой ортогональности функций $|\Phi_0(M)\rangle$ и $|\Psi_k(M)\rangle$.

Оценим теперь величину $\langle \Psi_k(M) | \mathbf{H} | \Psi_k(M) \rangle$. Опуская громоздкие выкладки, аналогичные приведенным в работе [19], получим

$$\langle \Psi_k(M) | \mathbf{H} | \Psi_k(M) \rangle = E_0 - \frac{2\pi}{N^2} \langle \Phi_0(M) | \sum_{i < j} (i-j)^2 J_{ij} (\mathbf{S}_i^x \cdot \mathbf{S}_j^x + \mathbf{S}_i^y \cdot \mathbf{S}_j^y) | \Phi_0(M) \rangle$$

Если $|\Phi_1(M)\rangle$ нижнее возбужденное состояние гамильтониана (2) с энергией E_1 , то, согласно вариационному принципу Релея-Ритца

$$E_1 \leq \langle \Psi_k(M) | \mathbf{H} | \Psi_k(M) \rangle, \quad \langle \Phi_0(M) | \Psi_k(M) \rangle = 0. \quad (10)$$

Следовательно, $E_1 - E_0 \sim \mathcal{O}(N^{-1})$, и регулярная гейзенберговская спиновая цепочка с нечетным числом спинов в элементарном звене не имеет щели в спектре возбуждений.

Отметим, что этот же результат был получен позднее в работе Аффлека [21], а еще позднее обобщен на случай гамильтониана Хаббарда.

Успешные синтезы квазиодномерных органических ферромагнетиков, таких как полидифенилкарбен [22], поли-ВИРО [23] и р-NPNN [24], привлекли значительный интерес к теоретическому моделированию магнитного упорядочения в таких материалах. Одной из наиболее простых моделей квазиодномерных органических ферромагнетиков была предложена Овчинниковым [9]. Она представляет собой полиеновую цепочку, четные атомы которой связаны радикальными группами, расположенными вдоль цепочки. Одним из простейших примеров такой молекулярной структуры является некекулевский углеводород – полиаллильная цепочка (Рис.1), каждый атом которой вносит по одному π -электрону в общую систему сопряжения.

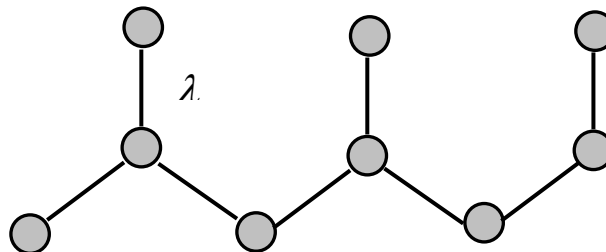


Рис. 1. Фрагмент полиаллильной цепочки.

Хорошо известно, что эффекты электронной корреляции оказывают значительное влияние на свойства квазиодномерных полимеров с сопряженными связями. Поэтому для адекватного описания нижней части энергетического спектра полиаллильной цепочки был использован гейзенберговский спиновый гамильтониан следующего вида

$$\mathbf{H} = \sum_i (\mathbf{S}_{3i-2} \cdot \mathbf{S}_{3i-1} + \mathbf{S}_{3i-1} \cdot \mathbf{S}_{3i+1} + \lambda \mathbf{S}_{3i-1} \cdot \mathbf{S}_{3i}), \quad \lambda \geq 0 \quad (11)$$

Здесь параметр $\lambda \neq 1$ моделирует взаимодействие радикальных центров с атомами полиеновой цепочки.

Согласно [9], основное состояние гамильтониана (11) имеет полный спин пропорциональный числу элементарных звеньев ($S_0 = L/2$) при любом положительном значении параметра λ .

Можно показать, что в основном состоянии альтернантных систем ненулевые спиновые плотности на атомах, принадлежащих разным подрешеткам имеют противоположные знаки [25,26]. Следовательно, основное состояние полиаллильной спиновой цепочки имеет структуру спиновой волны. Можно также показать, что точный спектр возбуждений бесконечной полиаллильной цепочки не имеет щели для любых неотрицательных значений λ . [20].

Более детальную картину энергетического спектра можно получить на основе точной диагонализации гамильтонианов малых решеточных кластеров. Однако возможности такого подхода ограничены вследствие экспоненциального роста базиса при увеличении размеров кластера и квазивырожденного характера спектра. Хорошей альтернативой численным расчетам в случае одномерных систем является метод группы перенормировки Вайта (density matrix renormalization group - DMRG) [2,27], позволяющий с высокой точностью находить нижнюю часть энергетического спектра соответствующего модельного гамильтониана.

Численные расчеты спектра малых решеточных кластеров и использование алгоритма метода DMRG для бесконечных систем показали существование трех различных типов возбуждений [28,29]. Первый тип возбуждений ведет к уменьшению полного спина цепочки ($S < S_0$) и при $S = S_0 - 1$ во многом аналогичен одномагнитным состояниям в однородной гейзенберговской цепочке с ферромагнитным взаимодействием соседних спинов. Второй тип возбуждений характеризуется увеличением полного спина ($S > S_0$) и имеет конечную энергетическую щель ΔE_1 . При малых значениях λ для оценки величины этой щели удобно применить теорию возмущений. Нижние энергетические уровни при $S > S_0$ располагаются в порядке возрастания полного спина. Поэтому для оценки щели в спектре возбуждений второго типа достаточно рассмотреть нижнее состояние, имеющее спин $S = S_0 + 1$. Будем считать для простоты, что это состояние характеризуется максимальным значением Z -проекции полного спина. Тогда при малых λ соответствующая волновая функция $\Psi(S_0 + 1, S_0 + 1)$ может быть аппроксимирована прямым произведением функции первого триплетного состояния однородной антиферромагнитной цепочки $\Phi(1,1)$ и одноэлектронных спиновых функций, описывающих изолированные радикальные центры (хвостовые атомы полиаллильной цепочки).

$$\Psi(S_0 + 1, S_0 + 1) = \Phi(1,1) \otimes \alpha \otimes \alpha \dots \otimes \alpha \quad (12)$$

Можно показать, что энергия этого состояния равна величине $E_1 + \lambda/4$, где E_1 - энергии первого триплетного состояния однородной цепочки и члена. Аналогично можно показать, что в первом порядке по λ энергия основного состояния полиаллильной цепочки совпадает с энергией основного состояния однородной спиновой цепочки с удвоенным числом элементарных звеньев. Поэтому для бесконечной цепочки при малых λ оценка щели в спектре возбуждений второго типа имеет вид $\Delta E_1 = \lambda/4$.

Третий тип возбуждений не меняет полный спин цепочки и, согласно численным расчетам, характеризуется энергетической щелью ΔE_2 ($\Delta E_2 < \Delta E_1$). Для бесконечной цепочки спектр

возбуждений безщелевой. Так как возбуждения второго и третьего типа имеют щель, то возбуждения первого типа должны быть безщелевыми при любом положительном значении λ .

Отметим также, что наличие щели в спектре возбуждений без изменения полного спина приводит к устойчивости полиаллильной цепочки к искажениям геометрии, не меняющим топологии цепочки (порядка связывания атомов). Однородная антиферромагнитная спиновая цепочка подобной устойчивости не имеет и переходит в димеризованное состояние с чередующимися короткими и длинными связями между соседними атомами.

3. Модель Изинга

Модель Изинга с конкурирующими ферромагнитными и антиферромагнитными взаимодействиями на кубической решетке (так называемая ANNNI-модель) была введена для описания упорядоченных магнитных фаз в кристаллах CeSb [12]. Аналогичная модель успешно используется для описания термодинамики масляных микроэмульсий и носит название модели Видома [13].

Рассмотрим двумерный аналог такой модели, представляющий интерес для описания пленок микроэмульсий на поверхности твердых тел. Предполагается, что подобные модели могут быть использованы для оптимизации процессов экстракции, например, при нефтедобыче [30]. С другой стороны методология DMRG, развитая в формализме трансфер-матрицы для описания термодинамики двумерной модели Изинга, успешно применяется для изучения одномерных квантовых моделей [31].

Гамильтониан модели имеет вид

$$\mathbf{H} = -\sum_{ij} [\sigma(i, j)\sigma(i, j\pm 1) + \sigma(i, j)\sigma(i\pm 1, j) + \alpha(\sigma(i, j)\sigma(i\pm 1, j\pm 1))] - \beta \sum_{ij} \sigma(i, j)\sigma(i, j\pm 2). \quad (13)$$

Здесь $\sigma(i, j) = \pm 1$ - “спиновая” переменная для узла квадратной решетки, расположенного на пересечении i -того ряда и j -того столбца решетки. Параметр α описывает интенсивность диагональных взаимодействий, а параметр β отвечает взаимодействию ближайших несоседних узлов, расположенных в одном ряду квадратной решетки.

Пусть прямоугольный фрагмент квадратной решетки размеров $N \times L$ свернут в цилиндр по столбцам ($\sigma(i, j) = \sigma(i, j + L)$). Термодинамика такой решетки характеризуется статистической суммой, которая может быть записана в виде следа L -й степени трансфер-матрицы \mathbf{T}_N .

$$Z = \text{Tr}(\mathbf{T}_N)^L \quad (14)$$

$$\mathbf{T}_N = \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 \\ \sigma'_1 & \sigma'_2 & \sigma'_3 & \sigma'_4 \end{pmatrix} \times \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_3 & \sigma_4 & \sigma_5 & \sigma_6 \\ \sigma'_3 & \sigma'_4 & \sigma'_5 & \sigma'_6 \end{pmatrix} \times \dots \times \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_{N-3} & \sigma_{N-2} & \sigma_{N-1} & \sigma_N \\ \sigma'_{N-3} & \sigma'_{N-2} & \sigma'_{N-1} & \sigma'_N \end{pmatrix}$$

где \mathbf{A} - матрица больцмановских весов блока из 8 спинов, расположенных в двух соседних рядах решетки

$$\begin{aligned} \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 \\ \sigma'_1 & \sigma'_2 & \sigma'_3 & \sigma'_4 \end{pmatrix} = \exp \left\{ \frac{1}{2T} \left[\sum_{i=1}^4 \sigma_i \sigma'_i + \frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^3 (\sigma_i \sigma_{i+1} + \sigma'_i \sigma'_{i+1}) + \sigma_2 \sigma_3 + \sigma'_2 \sigma'_3 \right) \right. \right. \\ \left. \left. + \alpha [\sigma_2 (\sigma'_1 + \sigma'_3) + \sigma'_2 (\sigma_1 + \sigma_3) + \sigma_3 (\sigma'_2 + \sigma'_4) + \sigma'_3 (\sigma_2 + \sigma_4)] \right. \right. \\ \left. \left. + \beta (\sigma_1 \sigma_3 + \sigma_2 \sigma_4 + \sigma_1 \sigma_3 + \sigma'_2 \sigma'_4) \right] \right\}. \end{aligned}$$

Здесь спиновые переменные σ_i и σ'_i относятся к двум соседним рядам (для простоты у них опущены первые индексы),

Таким образом, учет несоседних взаимодействий вдоль рядов решетки приводит к необходимости рассматривать трансфер-матрицу из перекрывающихся спиновых блоков [32,33].

В методе DMRG для классических систем типа двумерной модели Изинга ищется вариационная оценка для статистической суммы модели путем перенормировки ее трансфер-матрицы. При $\beta=0$ применим стандартный алгоритм DMRG для так называемых IRF моделей, развитый Нишино [34]. Численные расчеты в этом случае показывают монотонную зависимость внутренней энергии от температуры в интервале $-0.5 \leq \alpha \leq 0$ [35]. В то же время, температурная зависимость теплоемкости C_v имеет резкий максимум, высота которого увеличивается с числом итераций метода. Анализ спиновой структуры основного состояния модели показывает, что при $\beta=0$ и малых α она должна иметь фазовую диаграмму, похожую на диаграмму точно решаемой модели Изинга на квадратной решетке, которая имеет только один фазовый переход второго рода типа порядок-беспорядок. Поэтому максимум на температурной зависимости теплоемкости должен соответствовать фазовому переходу второго рода, а его положение определяет температуру этого перехода. Численные расчеты методом DMRG показывают линейное уменьшение критической температуры при уменьшении параметра диагональных взаимодействий в интервале $-0.5 \leq \alpha \leq 0$. Аналогичную картину дает приближенный метод оценки критической температуры предложенный в [36].

Необходимость использования трансфер-матрицы из перекрывающихся блоков при $\beta \neq 0$ требует незначительной модификации алгоритма DMRG. В нашем варианте алгоритма [33] расчет начинается с перенормировки трансфер-матрицы фрагмента прямоугольной решетки типа бесконечной полосы шириной 8 спинов. Аналогично трансфер-матрице \mathbf{T}_N двумерной решетки, эта матрица может быть представлена в виде трех перекрывающихся 8-спиновых блоков (рис.2).

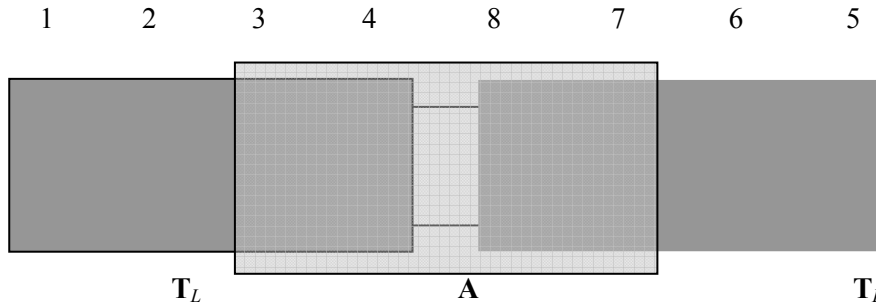


Рис. 2. Факторизованное представление трансфер-матрицы фрагмента прямоугольной решетки типа бесконечной полосы шириной 8 спинов.

В спиновом представлении эта матрица зависит от 16 спиновых переменных и имеет вид

$$\mathbf{T} = \mathbf{T}_L \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 \\ \sigma'_1 & \sigma'_2 & \sigma'_3 & \sigma'_4 \end{pmatrix} \times \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_3 & \sigma_4 & \sigma_8 & \sigma_7 \\ \sigma'_3 & \sigma'_4 & \sigma'_8 & \sigma'_7 \end{pmatrix} \times \mathbf{T}_L \begin{pmatrix} \sigma_8 & \sigma_7 & \sigma_6 & \sigma_5 \\ \sigma'_8 & \sigma'_7 & \sigma'_6 & \sigma'_5 \end{pmatrix} \quad (15)$$

где

$$\mathbf{T}_L \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 \\ \sigma'_1 & \sigma'_2 & \sigma'_3 & \sigma'_4 \end{pmatrix} = \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_1 & \sigma_2 & \sigma_3 & \sigma_4 \\ \sigma'_1 & \sigma'_2 & \sigma'_3 & \sigma'_4 \end{pmatrix} \times \exp \left\{ \frac{1}{2T} \left[\sigma_1 \sigma'_1 + \sigma_2 \sigma'_2 + \frac{1}{2} (\sigma_1 \sigma_2 + \sigma'_1 \sigma'_2) + \beta (\sigma_1 \sigma'_2 + \sigma_2 \sigma'_1) \right] \right\}$$

Матрица \mathbf{T} имеет размерность $2^8 = 256$. Аналогично стандартному алгоритму DMRG сначала находится собственный вектор матрицы \mathbf{T} , отвечающий ее наибольшему собственному значению. Затем с его помощью строится редуцированная матрица плотности для левой половины спиновой системы (вследствие симметрии она совпадает с аналогичной матрицей для правой половины системы). Затем прямой диагонализацией матрицы плотности определяются ее m наибольших собственных значений и соответствующих собственных векторов. Эти вектора используются для перенормировки блоков трансфер-матрицы. При первой перенормировке

они используются в качестве строк прямоугольной матрицы-проектора $\mathbf{Q}(x|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4)$ ($x = 1, 2 \dots m$). Соответствующая процедура перенормировки имеет вид

$$\mathbf{T}_L \begin{pmatrix} x, \sigma_5, \sigma_6 \\ y, \sigma'_5, \sigma'_6 \end{pmatrix} = \sum_{\substack{\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \sigma'_4, \\ \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4}} \mathbf{Q}^+ (y|\sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \sigma'_4) \times \mathbf{T}_L \begin{pmatrix} \sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4 \\ \sigma'_1, \sigma'_2, \sigma'_3, \sigma'_4 \end{pmatrix} \times \mathbf{A} \begin{pmatrix} \sigma_3, \sigma_4, \sigma_5, \sigma_6 \\ \sigma'_3, \sigma'_4, \sigma'_5, \sigma'_6 \end{pmatrix} \times \mathbf{Q} (x|\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3, \sigma_4) \quad (16)$$

Это означает, что после первой перенормировки ширина бесконечной полосы увеличивается на 4 спина. Процедура перенормировки повторяется до тех пор, пока локальные термодинамические характеристики модели (например, удельная теплоемкость) перестанут меняться. При этом полная размерность трансфер-матрицы полосы остается неизменной (равной $16m^2$).

Численные расчеты по приведенному выше алгоритму показали, что при малых значениях параметров несоседних взаимодействий α и β наблюдается монотонная температурная зависимость внутренней энергии и один резкий максимум на температурной зависимости удельной теплоемкости (рис.3).

При $\alpha=0$, отрицательных β и $m=4$ аналогичная картина наблюдалась вплоть до величины $\beta=-0.5$.

Нами были также проведены аналогичные расчеты для $\alpha=2\beta$, как в модели Видома. Здесь монотонное поведение внутренней энергии наблюдалось в интервале $0.3 < \alpha < 0$ [33].

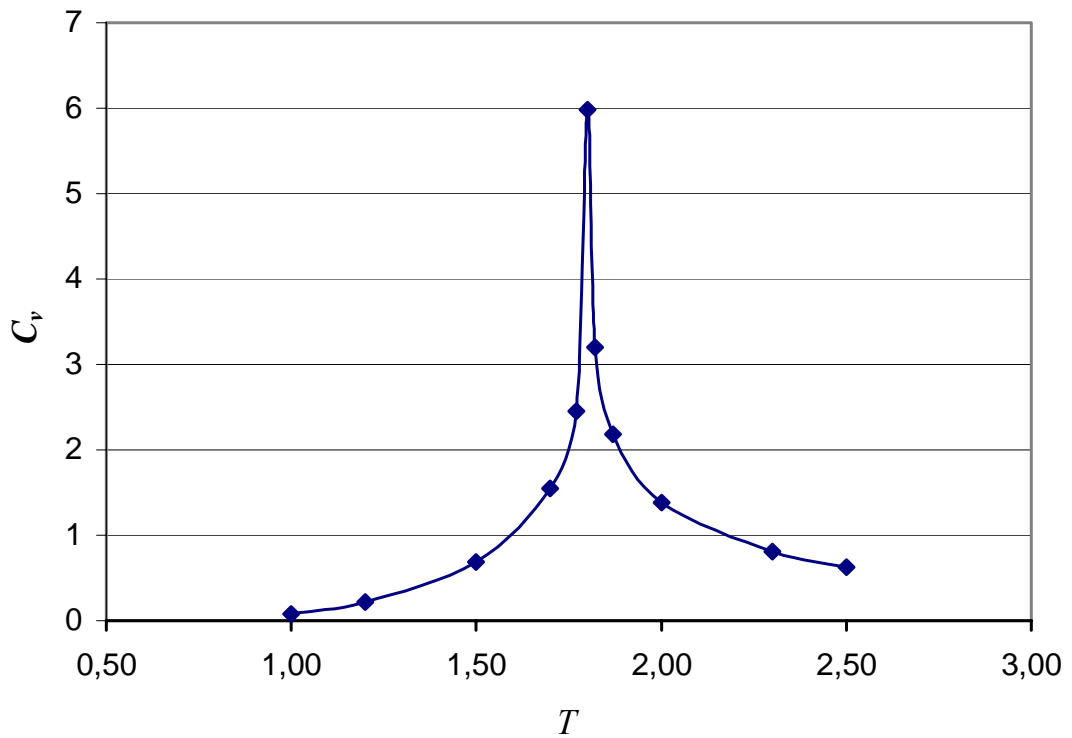


Рис. 3. Температурная зависимость удельной теплоемкости C_v для случая $\alpha = 0, \beta = -0.2$, вычисленная после 500 итераций при $m=4$.

4. XY и XXZ-модели

Одной из наиболее простых анизотропных спиновых моделей является одномерная XY модель. Она адекватно описывает магнитные свойства ряда реальных материалов и, в то же время, имеет простую структуру точного энергетического спектра [19]. Вследствие повышенного интереса к решеточным спиновым моделям лестничного типа представляет интерес система из двух XY цепочек спина $1/2$, связанных между собой взаимодействием изинговского типа. Впервые подобная система изучалась в работе [37], где было показано, что, в случае одинаковых цепочек, гамильтониан модели может быть преобразован в гамильтониан одномерной модели Хаббарда посредством преобразования Йордана-Вигнера. Поэтому спектр такой анизотропной спиновой модели может быть найден точно с помощью анзаца Бете.

При различных значениях обменных интегралов XY цепочек аналогичное преобразование ведет к одномерной модели Хаббарда с резонансными интегралами, зависящими от проекции электронного спина [38]. Такая обобщенная модель представляет интерес для моделирования магнитной структуры квазиодномерных биметаллических магнетиков, а также процессов электронного переноса, зависящих от проекции спина. Однако ее спектр имеет гораздо более сложную структуру по сравнению с моделью, предложенной в [37] и может быть найден точно только для одно- и двухмагнетонных состояний. Многомагнетонные состояния в случае различных XY цепочек изучались в рамках приближения БКШ и с помощью метода DMRG [38]. Был также получен ряд общих заключений о характере точного спектра модели.

Пусть система двух взаимодействующих XY цепочек спина $1/2$ описывается гамильтонианом следующего вида:

$$\mathbf{H} = -\sum_{\alpha,n} 2\mu_{\alpha} h S_{\alpha,n}^z - \sum_{\alpha,n} J_{\alpha} (S_{\alpha,n}^x S_{\alpha,n+1}^x + S_{\alpha,n}^y S_{\alpha,n+1}^y) - J_0 \sum_n S_{1,n}^z S_{2,n}^z, \quad \alpha = 1, 2. \quad (17)$$

где, $S_{1,n}^x, S_{2,n}^x$ – x -компоненты одноэлектронных спиновых операторов первой и второй XY цепочек соответственно; J_1, J_2 – обменные интегралы этих цепочек; J_0 описывает изинговское взаимодействие цепочек; h – постоянное магнитное поле, направленное вдоль оси z , а μ_1, μ_2 – соответствующие магнетоны.

Так как операторы $\sum_n S_{\alpha,n}^z$, $\alpha=1,2$ коммутируют с гамильтонианом (1), то его собственные состояния характеризуются числами повернутых спинов N_1 и N_2 для первой и второй цепочек соответственно. Используя унитарное преобразование [4]

$$S_{\alpha,n}^x \rightarrow (-1)^n S_{\alpha,n}^x, \quad S_{\alpha,n}^y \rightarrow (-1)^n S_{\alpha,n}^y, \quad S_{\alpha,n}^z \rightarrow S_{\alpha,n}^z, \quad (18)$$

можно изменить знаки обменных интегралов J_{α} для одной или одновременно для обеих цепочек, если число элементарных ячеек решетки N четное. Поэтому точный спектр (1) не зависит от знаков J_{α} в случае четных N и можно выбрать эти знаки таким образом, что в базисе функций, имеющих вид произведения одноэлектронных спиновых функций (спиновых конфигураций) все недиагональные элементы (17) не будут иметь положительных значений. С другой стороны, для заданных значений параметров $h, J_{\alpha} \neq 0, J_0, N_1$, и N_2 матрица гамильтониана не может быть приведена к блочно-диагональному виду с помощью перестановок строк или столбцов. Поэтому, согласно теореме Перрона-Фробениуса, нижнее состояние (17) из соответствующего подпространства невырожденное для четных N и заданных значениях выше приведенных параметров. В случае решетки типа полосы это заключение справедливо для любых N .

Как уже отмечалось выше, при $J_1 = J_2$ гамильтониан решетки типа полосы может быть сведен к гамильтониану одномерной модели Хаббарда. В случае, когда $J_1 \neq J_2$ преобразование Йордана-Вигнера приводит к одномерной фермионной модели следующего вида:

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 - \mu_1 h (N - 2N_1) - \mu_2 h (N - 2N_2) - \frac{J_0 (N - 2N_1 - 2N_2)}{4}, \quad (19)$$

$$\mathbf{H}_1 = -\frac{1}{2} \left(\sum_{i=1}^{N-1} J_1 a_{i\alpha}^+ a_{i+1\alpha} + J_2 a_{i\beta}^+ a_{i+1\beta} + H.c. \right) - J_0 \sum_{i=1}^N a_{i\alpha}^+ a_{i\alpha} a_{i\beta}^+ a_{i\beta}.$$

При этом, полное число частиц в \mathbf{H}_1 совпадает с числом повернутых спинов ($N_1 + N_2$) в гамильтониане (17), а числа α - и β -частиц совпадают с N_1 и N_2 соответственно. Применяя унитарное преобразование частицы-дырки для Ферми-операторов α -частиц $a_{i\alpha} \rightarrow (-1)^i a_{i\alpha}^+$ можно легко показать, что аналогично одномерной модели Хаббарда [39], точный энергетический спектр \mathbf{H}_1 для положительных и отрицательных значений J_0 удовлетворяет следующему соотношению:

$$E(N_1, N_2; |J_0|) = N_1 |J_0| + E(N_1, N - N_2; -|J_0|). \quad (20)$$

Аналогичные формулы были получены для лестничной модели, состоящей из n одинаковых XY цепочек ($n > 2$), связанных взаимодействием изинговского типа [40].

Нами была также изучена более сложная анизотропная спиновая модель лестничного типа, описываемая гамильтонианом

$$\begin{aligned} \mathbf{H} = & -\sum_{\alpha, n} 2\mu_\alpha h S_{\alpha, n}^z - \sum_{\alpha, n} J_\alpha (\mathbf{s}_{\alpha, n}^x \mathbf{s}_{\alpha, n+1}^x + \mathbf{s}_{\alpha, n}^y \mathbf{s}_{\alpha, n+1}^y + \gamma_\alpha \mathbf{s}_{\alpha, n}^z \mathbf{s}_{\alpha, n+1}^z) \\ & - J_0 \sum_n \mathbf{s}_{1, n}^z \mathbf{s}_{2, n}^z - J_0' \sum_n (\mathbf{s}_{1, n}^z \mathbf{s}_{2, n+1}^z + \mathbf{s}_{1, n+1}^z \mathbf{s}_{2, n}^z), \quad \alpha = 1, 2. \end{aligned} \quad (21)$$

Был изучен точный двухмагнетонный спектр модели и показано, что при специальном выборе параметров, гамильтониан (21) сводится к одномерной обобщенной модели Хаббарда [41].

$$\mathbf{H} = \mathbf{H}_1 - \left(\frac{1}{4} U_0 + U_1 \right) (L - 2N) - h [\mu_1 (L - 2N_1) + \mu_2 (L - 2N_2)] \quad (22)$$

$$\mathbf{H}_1 = \left(\sum_i t_1 \mathbf{a}_{i,\uparrow}^+ \mathbf{a}_{i+1,\uparrow} + t_2 \mathbf{a}_{i,\downarrow}^+ \mathbf{a}_{i+1,\downarrow} + H.c. \right) + U_0 \sum_i \mathbf{a}_{i,\uparrow}^+ \mathbf{a}_{i,\uparrow} \mathbf{a}_{i,\downarrow}^+ \mathbf{a}_{i,\downarrow} + U_1 \sum_i \sum_{\sigma, \bar{\sigma}} \mathbf{a}_{i,\sigma}^+ \mathbf{a}_{i,\sigma} \mathbf{a}_{i+1,\bar{\sigma}}^+ \mathbf{a}_{i+1,\bar{\sigma}}$$

5. Модель Хаббарда с бесконечным отгалкиванием

Симметрия частицы-дырки для гамильтониана Хаббарда приводит к тому, что энергетические спектры альтернантных решеток, содержащих N и $2L - N$ электронов совпадают. Поэтому в дальнейшем ограничимся рассмотрением N -электронной системы на решетке из L узлов (ионов) при $N \leq L$. Бесконечное кулоновское отгалкивание в этом случае приводит к запрету двукратного заполнения электронами узлов решетки. Поэтому волновая функция решетки, отвечающая проекции полного спина решетки M , в этом случае может быть определена по формуле

$$\begin{aligned} \Psi_r(L, N, M) &= \sum_{l=1}^D A_l^r(n_1, n_2, \dots, n_N | \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \prod_{i=1}^N a_{n_i, \sigma_i}^+ |0\rangle \\ &= \sum_{l=1}^D A_l^r(n_1, n_2, \dots, n_N | \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N) \Phi(n_1, n_2, \dots, n_N) \times |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle. \end{aligned} \quad (23)$$

$$D = \frac{L!}{(L-N)!(N/2-M)!(N/2+M)!}$$

Здесь $\Phi(n_1, n_2, \dots, n_N)$ – координатная функция, описывающая распределение N электронов по L узлам решетки; n_i обозначает номер однократно занятого узла; D – размерность пространст-

ва N -электронных волновых функций на решетке из L узлов при условии запрета двукратного заполнения узлов; $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$ – функция спиновых переменных σ_i , описывающая спиновую конфигурацию системы электронов:

$$S_i^z |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle = \sigma_i |\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle, \quad \sigma_i = \pm 1/2,$$

(S_i^z – оператор z -проекции спина i -го электрона); $A_l^r(n_1, n_2, \dots, n_N | \sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N)$ – вес соответствующей координатно-спиновой конфигурации, входящей в полную волновую функцию решетки.

Несмотря на более простую алгебраическую структуру этой модели по сравнению с обычной моделью Хаббарда, ее точный спектр известен только в некоторых специальных случаях [42]. Простейшим таким случаем является линейная цепочка, состоящая из L узлов. Если занумеровать все электроны такой цепочки последовательно по узлам вдоль цепочки, то, как легко видеть, перескоки электронов между соседними узлами не меняют последовательность номеров электронов (Рис.4). Следовательно, гамильтониан (1) в случае бесконечного отталкивания не меняет спиновую конфигурацию электронов (не меняет вектор $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$).

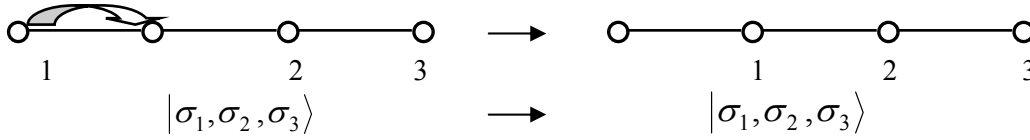


Рис.4. Неизменность спиновой конфигурации при переносе электронов вдоль линейной цепочки ионов.

В результате точный спектр линейной цепочки оказывается вырожденным по спину. В случае, когда все резонансные интегралы между узлами одинаковы ($t_{ii+1} = t$), точный спектр цепочки имеет простой вид для любых значений L и N :

$$E_r(N, L) = 2t \sum_{i=1}^N \cos\left(\frac{\pi r_i}{L+1}\right), \quad 1 \leq r_1 < r_2 < \dots < r_N \leq L, \quad (24)$$

При $t < 0$ основному состоянию цепочки отвечает набор чисел $r_i = i$.

Волновая функция, отвечающая состоянию $E_r(N, L)$ линейной цепочки имеет более громоздкий вид:

$$\Psi_r(L, N, M) = \sum_{l=1}^D A_l^r(n_1, n_2, \dots, n_N) \prod_{i=1}^N a_{n_i, \sigma_i}^+ |0\rangle, \quad 1 \leq n_1 < n_2 < \dots < n_N \leq L, \quad (25)$$

где, вследствие вырождения, веса A_l^r не зависят от спиновых переменных:

$$A_l^r(n_1, n_2, \dots, n_s) = \det[f(r_1 n_1) f(r_2 n_2) \dots f(r_s n_s)],$$

$$f(r_i, n_j) = \sqrt{\frac{2}{n+1}} \sin\left(\frac{\pi r_i n_j}{n+1}\right).$$

В случае решеток нелинейной топологии гамильтониан (1) с бесконечным отталкиванием в общем случае перемешивает различные спиновые конфигурации (Рис.5), делая задачу определения точного спектра гораздо более сложной. Поэтому изучение энергетического спектра таких решеток обычно проводится различными приближенными методами, а также численным моделированием путем непосредственной диагонализации матриц гамильтонианов конечных решеточных кластеров. Для одномерных систем хорошей альтернативой подобным кластерным

расчетам является метод DMRG, позволяющий получать различные характеристики модели с высокой точностью.

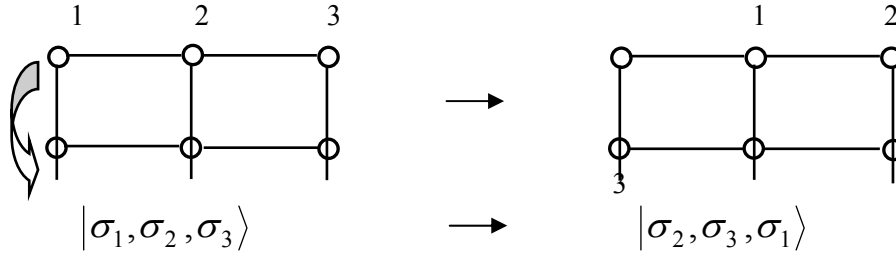


Рис. 5. Изменение спиновой конфигурации при переносе первого электрона для фрагмента квадратной решетки с последовательной нумерацией электронов по рядам.

Рассмотренный на рис. 5 процесс переноса электрона с первого ряда решетки на второй приводит к циклической перестановке спиновых переменных против часовой стрелки. Эта перестановка может быть записана в символьном виде следующим образом:

$$\mathbf{Q}_{1,3} = \begin{pmatrix} 1 & 2 & 3 \\ 3 & 1 & 2 \end{pmatrix}, \quad \mathbf{Q}_{1,3} |\sigma_1, \sigma_2, \sigma_3\rangle = |\sigma_2, \sigma_3, \sigma_1\rangle. \quad (26)$$

Обобщая выше приведенное рассмотрение на решетки произвольной топологии, можно показать, что при последовательной нумерации электронов вдоль рядов решетки гамильтониан Хаббарда с бесконечным отталкиванием может быть записан в следующем виде

$$\mathbf{H} = \sum_{i < j}^L t_{ij} (\mathbf{b}_i^+ \mathbf{b}_j \mathbf{Q}_{m,n}^+ + \mathbf{b}_j^+ \mathbf{b}_i \mathbf{Q}_{m,n}), \quad (27)$$

где циклическая перестановка $\mathbf{Q}_{m,n}$ переставляет против часовой стрелки спиновые переменные электронов, расположенных на узлах решетки с номерами $i \leq l \leq j$; \mathbf{b}_i^+ – бесспиновый ферми-оператор, описывающий “рождение” электрона на i -ом узле решетки (этот оператор действует только на координатную часть полной волновой функции) [43].

Формула (27) является точным представлением гамильтониана Хаббарда с бесконечным отталкиванием. Появление операторов бесспиновых фермионов в (27), обусловлено запретом двукратного заполнения узлов решетки электронами и принципом запрета Паули. Скалярный тип гамильтониана Хаббарда позволяет использовать при построении матричных элементов (27) базисные функции правильной спиновой симметрии Θ_α^{SM} (собственные функции квадрата полного спина) вместо набора спиновых конфигураций $|\sigma_1, \sigma_2, \dots, \sigma_N\rangle$. Это значительно упрощает численные расчеты точного спектра малых решеточных кластеров вследствие понижения размерности соответствующей проблемы собственных значений. Кроме того, основные вычисления при построении матричных элементов гамильтониана выполняются в спиновом пространстве, размерность которого часто значительно меньше размерности полного координатно-спинового пространства. Рассмотренный выше формализм также удобен для аналитических выкладок, например, построения эффективных гамильтонианов в рамках теории возмущений для решеток с сильной пространственной анизотропией [42-45].

В качестве примера рассмотрим энергетический спектр модели Хаббарда с бесконечным отталкиванием на фрагменте треугольной решетки, имеющем вид полосы размерами $2 \times L$, состоящей из слабо взаимодействующих двухцентровых сегментов (рис.6).

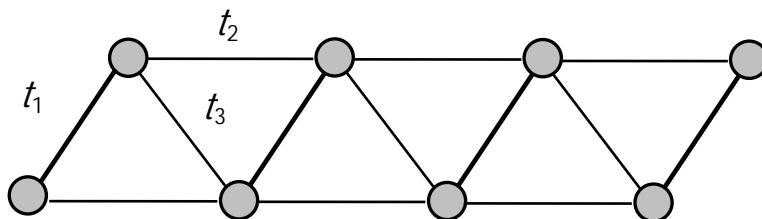


Рис. 6. Фрагмент анизотропной треугольной решетки.

Можно показать, что если полное число электронов N меньше или равно числу двухцентровых сегментов L , то с точностью до членов третьего порядка малости по взаимодействию между сегментами, гамильтониан такой модели сводится к гейзенберговскому спиновому гамильтониану на однородной цепочке. Число узлов цепочки совпадает с числом электронов, а параметры спинового гамильтониана определяются через параметры исходной модели Хаббарда и электронную концентрацию.

$$\mathbf{H} = -\frac{L|t_2|}{\pi}(2-\mu)\sin(2\pi\rho) - N\frac{t_2^2\mu^2}{4|t_1|} + \frac{2t_2^2}{|t_1|}(1-\mu)\left(\rho - \frac{\sin(4\pi\rho)}{4\pi}\right)\sum_{i=1}^N\left(\mathbf{S}_i\mathbf{S}_{i+1} - \frac{1}{4}\right), \quad (28)$$

где $\rho = \frac{N}{2L}$, $\mu = \frac{t_3}{t_2} \text{sign}(t_1)$

Легко видеть, что основное состояние этого гамильтониана имеет минимальный спин при $\mu < 1$ и максимальный спин при $\mu > 1$.

Литература

1. А.А. Овчинников, И.И. Украинский, Г.Ф. Квенцель. Теория одномерных моттовских полупроводников и электронная структура длинных молекул с сопряженными связям. Успехи физ.наук 1972, Т.108, №1, С.81-111.
2. S.R. White. Strongly correlated electron systems and the density matrix renormalization group, Phys. Reports 1998, V.301, P.187-204.
3. I. Moreira, R. Dovesi. Periodic approach to the electronic structure and magnetic coupling in KCuF_3 , K_2CuF_4 , and $\text{Sr}_2\text{CuO}_2\text{Cl}_2$ low-dimensional magnetic systems Int.J.Quant.Chem. 2004, V.99, P.805-823.
4. E.H. Lieb. The Hubbard Model: Its Physics and Mathematical Physics. Edited by D.Baeriswyl. Plenum Press, New York 1995, NATO ASI Series B: Physics V.343, P.1-19.
5. D.J. Klein. J. Ground-state features for Heisenberg models, Chem. Phys. 1982 V.77, No.6, P.3098-3100.
6. Л.Н. Булаевский. Квазигомеоплярные уровни электронов в кристаллах и молекулах. Журн.эксперим. и теорет.физики 1966, Т.51, №1, С.230-239.
7. А.А Овчинников, В.О. Черановский. Метод спинового гамильтониана в квантовой химии. В кн. "Современные проблемы квантовой химии", Л. Наука, 1986, С.123-164.
8. Wu J, T.G. Schmalz, D.J. Klein. Semilempirical valence-bond resonance energies for alternant conjugated hydrocarbons containing four-membered rings Int. J. Quant. Chem. 2003, V.95, No.4-5, P.455-460.
9. A.A. Ovchinnikov. Multiplicity of ground state of large alternant organic molecules with conjugated bonds, Theor. Chim. Acta 1978, V.47, No 4 P.297-304.
10. A.L. Tchougreeff., I.A. Misurkin. Intra-atomic exchange and ferromagnetic interaction in metal-locene-based donor-acceptor stacked crystals, J. Phys.Rev. B 1992 V.46, No.9, P.5357-5365.
11. L. Onsager. Crystal statistics. I. A two-dimensional model with an order-disorder transition, Phys.Rev. 1944, V.65, No.3-4, P.117-149.

12. R.J. Elliott. Phenomenological discussion of magnetic ordering in the heavy rare-earth metals, *Phys.Rev.* 1961, V.124, P.346-353.
13. B. Widom. Lattice model of microemulsion, *J.Chem.Phys.* 1986, V.84, P.6943-6954.
14. W. Selke. The ANNNI model – theoretical analysis and experimental application, *Phys. Rep.* 1988, V.170, P.213-264.
15. Л.Н. Булаевский. К теории неоднородной антиферромагнитной цепочки спинов, *ЖЭТФ*, 1963, Т.44, №3, С.1008-1013.
16. А.А. Овчинников, В.О. Черановский. Электронная структура ферромагнитных полимеров с сопряженными связями, *Теор. Эксперим. Химия* 1981, Т.17, №.1, С.10-20.
17. А.А. Овчинников, В.О. Черановский. Электронная структура органических полимерных ферромагнетиков на основе полидиацетилена. *ФТТ*, 1987, Т.29, №.10, С.3100-3107.
18. Y. Nagaoka. Ferromagnetism in narrow, almost half-filled s band, *Phys. Rev.* 1966, V.147, No.1, P.392-405.
19. E.H. Lieb, J. Schultz, D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain, *Ann. Phys.* 1961, V.16, No 3, P.407-466.
20. А.А. Овчинников, В.О. Черановский. О спектре возбуждений магнитных альтернатных цепочек с нечетным числом атомов в элементарном звене. *Доклады АН СССР Физика* 1982, Т.266, № 4, С.838-840.
21. I. Affleck, E.H. Lieb. A proof of part of Haldane conjecture on spin chains. *Lett. Math.Phys.* 1986, V.12 No.1, P.57-69.
22. H. Iwamura, T. Sugawara, K. Itoh, T. Takui. High-spin polycarbenes as a model for organic ferromagnets, *Mol. Cryst. Liq. Cryst.* 1985, V.125, No 1-4, P.251-260
23. Y.V. Korshak, T.V. Medvedeva, A.A. Ovchinnikov, V.N. Spector. Organic polymer ferromagnet, *Nature* 1987, V.326 (6111), P.370-472.
24. M. Takahashi. et al. Discovery of a quasi-1D organic ferromagnet, *p-NPNN Phys. Rev. Lett.* 1991, V.67, No.6, P.746.
25. А.А. Овчинников, В.О. Черановский. К теории возмущений в методе спинового гамильтониана. *Теор. Эксперим. Химия* 1980, Т.16, №.2, С.147-153.
26. D.J. Klein, N.H. March. Molecular magnetism via resonating valence bonds for conjugated radicals and selected transition metal complexes, *Int..J.Quant.Chem.* 2001, V.85, No.4-5, P.327-344.
27. S.R. White. Density matrix formulation for quantum renormalization groups, *Phys.Rev.Lett.*, 1992, V.69, P.2863-2866.
28. О.А. Жикол, В.О. Черановский. О спектре полиаллильной спиновой цепочки, *Физика Низких Температур* 1996, Т.22, № 7, С.793-797.
29. V.O. Chervanovskii, I. Ozkan. The ground state spin ordering and lowest energy excitations of a model organic ferrimagnet-polyallyl spin chain. *J. Magn. Magn. Mater.* 2001, V.223, No.2, P.156-162.
30. D. Chowdhury, D. Stauffer. Amphiphilic membranes in thin films of a complex fluid: Statics and dynamics in lattice models, *J.Chem.Phys.* 1991, V.95, No.10, P.7664-7677.
31. T. Wada, T.J. Nishino. Interaction-round-a-face density-matrix-renormalization group method, *cond-mat/0103508 v1*, 2001.
32. A. Gendiar, A. Šurda. Incommensurate structures studied by a modified density-matrix renormalization-group method, *Phys.Rev. B* 2000, V.62, No.6, p.3960-3967.
33. V.O.Chervanovskii, T.O.Kuznetsova, I.Ozkan. Phase transitions in 2D-Ising model with competing interactions, *Internet Electronic Journal of Molecular Design* 2004, No.3 P.233-240.
34. T.J. Nishino. Density matrix renormalization group method for 2D classical models, *J. Phys. Soc. Jpn.* 1995, V.64, P.3598-3601.
35. В.О. Черановский, Т.О. Кузнецова. Термодинамика жидких пленок, описываемых моделью Изинга с конкурирующими взаимодействиями. *Вестник ХНУ Серия химическая*, 2001, №7, С.41-43.
36. N.M. Švrčić. Critical temperatures of Ising model, *Physics Letters*, 1980, V.80A, P.43-44.
37. H. Shiba. Thermodynamic properties of one-dimensional half-filled-band Hubbard model/ 2. Application of grand canonical method, *Prog. Theor. Phys.* 1972, V.48, No.6B, P.2171-2186.
38. V.O. Chervanovskii, E.V. Ezerskaya, I. Ozkan. The energy spectrum of a spin-1/2 ladder with mixed interactions. *J.Phys. C.* 2001, V.13, No.20, P.4525-4534.

39. E.H. Lieb, F.Y. Wu. Absence of Mott transition in an exact solution of the short-range, one-band model in one dimension, Phys. Rev. Lett. 1968, V.20, No.25, P.1445-1448.
40. V.O. Cheranovskii, E.V. Ezerskaya, T.O. Kuznetsova. On the energy spectrum of a spin lattice formed by a finite number of coupled spin-1/2 XY chains, J.Phys. C 2002 V.14, No.34, P.8025-8032.
41. V.O. Cheranovskii, E.V. Ezerskaya, I. Ozkan. Energy spectrum of extended Hubbard model with spin-dependent hopping and related spin ladder model. Int. J. Quant. Chem. 2002, V.88, No.4, P.398-402.
42. V.Ya. Krivnov, A.A. Ovchinnikov, V.O. Cheranovskii. Magnetic properties of the Hubbard model with infinite interactions, Synth. Metals. 1989. V.33, No.1, P.65-79.
43. V.O. Cheranovskii. The application of cyclic spin permutations to the theory of strongly correlated electron systems. Int.J.Quant. Chem. 1992, V.41, No.5, P.695-708.
44. V.O. Cheranovskii, O. Esenturk, H.O. Pamuk. Magnetic properties of multiband $U=\infty$ Hubbard model on anisotropic triangular and rectangular lattice strips, Phys.Rev. B 1998, V.58, No.18, P.12260-12266.
45. V.O. Cheranovskii. Spin permutation technique in the theory of strongly correlated electron systems, In Valence Bond Theory ed. by D.L.Cooper. Theoretical and Computational Chemistry, V.10 Elsevier: Science. 2002, P.699-727.

Поступила в редакцию 3 сентября 2004 г.

Kharkov University Bulletin. 2004. №626. Chemical Series. Issue 11(34). V.O. Cheranovskii. Effective spin Hamiltonians in the theory of low-dimensional magnets.

An application of effective spin Hamiltonians to the study of low-energy states of one-dimensional magnetic systems such as ladder compounds of transition metals and conjugated polymers is briefly considered. Special attention was concentrated on the properties of exact energy spectra of corresponding models. The results of numerical simulation of thermodynamics of 2-D Ising model with competing interactions are also given.