

UNIVERZITA PAVLA JOZEFA ŠAFÁRIKA V KOŠICIACH

PRÍRODOVEDECKÁ FAKULTA

Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky

**Kritické vlastnosti anizotropného kvantového
Heisenbergovho modelu so zmiešanými spinmi**

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Vladislav Pokorný

Košice 2008

UNIVERZITA PAVLA JOZEFA ŠAFÁRIKA V KOŠICIACH

PRÍRODOVEDECKÁ FAKULTA

Katedra teoretickej fyziky a astrofyziky

**Kritické vlastnosti anizotropného kvantového
Heisenbergovho modelu so zmiešanými spinmi**

DIPLOMOVÁ PRÁCA

Vladislav Pokorný

Vedúci diplomovej práce: prof. RNDr. Andrej Bobák, DrSc.

Košice 2008

Čestné vyhlásenie:

Vyhlasujem, že som na uvedenej práci pracoval sám pod vedením vedúceho diplomovej práce prof. RNDr. Andreja Bobáka, DrSc. a s využitím uvedenej literatúry.

.....
Vladislav Pokorný

Anotácia

Táto práca sa zaoberá štúdiom kritických vlastností anizotropného kvantového Heisenbergovho modelu so zmiešanými spinmi 1 a 1/2 použitím Oguchiho párovej aproximácie. Prezentovaný je úplný súbor vlastných hodnôt a vlastných funkcií párového hamiltoniánu ako aj analytické vzťahy pre podmriežkové magnetizácie a voľnú energiu. Teória je vypracovaná pre mriežky s ľubovoľným koordinačným číslom z , avšak numerické výsledky sú prezentované pre jednoduchú kubickú mriežku ($z = 6$), pre ktorú sú analyzované kritické a trikritické vlastnosti v závislosti na výmennej a jednoiónovej anizotropii. Prezentované sú kompletne fázové diagramy, na ktorých sa okrem klasickej feromagnetkej usporiadanej fázy objavuje nová, nízkoteplotná kvantová fáza.

Abstract

In this work we study the critical properties of the anisotropic mixed spin-1 and spin-1/2 quantum Heisenberg model using the Oguchi approximation. A complete set of eigenvalues and eigenfunctions of the pair Hamiltonian is presented together with analytical expressions of sublattice magnetizations and free energy. Although the theory is developed for lattices with general coordination number z , we treat in detail the system on the simple cubic lattice ($z = 6$) where the critical and tricritical behaviour in dependence on the both exchange anisotropy and uniaxial single-ion anisotropy is analysed. The complete phase diagrams are presented, where aside from the classical ferromagnetic ordered phase a new, low-temperature quantum ordered phase, is discovered.

Obsah

Zoznam obrázkov	5
Zoznam tabuliek	5
1 Úvod	6
2 Formulácia	8
2.1 Model	8
2.2 Termodynamické vlastnosti modelu	17
2.3 Kritické vlastnosti modelu	20
2.4 Základný stav	22
3 Numerické výsledky a diskusia	24
3.1 Isingov model ($\Delta = 1$)	24
3.2 Heisenbergov model	28
4 Záver	35
5 Dodatky	36
5.1 Isingova báza ortonormovaných vektorov	36
5.2 Vyjadrenie Hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ v ľubovoľnej báze ortonormovaných funkcií .	38
5.3 Koeficienty rozvojov podmriežkových magnetizácií m_A a m_B	43
Literatúra	46

Zoznam obrázkov

1	Priemet krivky trikritickejch bodov pozdľz osi parametra Δ	25
2	Fázový diagram pre $\Delta = 1$ (Isingov model).	26
3	Fázový diagram pre $\Delta = 0.5$ (anizotropný Heisenbergov model).	28
4	Fázový diagram pre $\Delta = 0$ (izotropný Heisenbergov model).	29
5	Teplotná závislosť podmriežkových magnetizácií pre rôzne hodnoty D/J pre $\Delta = 0$: (a) $D/J = -2.6$, (b) $D/J = -2.76$, (c) $D/J = -2.8$, (d) $D/J = -2.9$	30
6	Fázové diagramy v rovine (Δ, T) pre rôzne hodnoty D/J	31
7	Závislosť podmriežkových magnetizácií a celkovej magnetizácie v základnom stave pre $\Delta = 0$	33
8	Závislosť vnútornej energie na D/J v základnom stave pre $\Delta = 0$	33
9	Závislosť kritickej hodnoty D_c na parametri Δ	34

Zoznam tabuliek

1	Súradnice trikritickejch bodov v rovine (D, T) pre rôzne hodnoty paramet- ra Δ	24
---	--	----

1 Úvod

V posledných rokoch bol značný počet teoretických prác venovaný štúdiu systémov s mixovanými isingovskými spinmi [1-8]. Tieto modely boli študované nielen z čisto teoretického záujmu, ale tiež preto, že je možné ich použiť pre popis istého druhu molekulárnych magnetík, ktoré sú skúmané experimentálne. Medzi týmito materiálmi mnohé binárne, ternárne a quaternárne molekulárne magnetiká vykazujú ferimagnetické usporiadanie a zdá sa, že sa dajú dobre popísať pomocou modelov s mixovanými spinmi. Pretože mixované spinové systémy majú menšiu symetriu ako odpovedajúce jednospinové modely, môžu vykazovať rôzne nové javy, ktoré nie sú pozorované v jednospinových isingovských modeloch. Napríklad vo ferimagnetikách môžu rozdielne teplotné závislosti podmriežkových magnetizácií viesť k existencii kompenzačných teplôt [9,10]: teplôt pod kritickou teplotou, kde celková magnetizácia je nulová. Toto zaujímavé správanie sa celkovej magnetizácie má dôležité aplikácie v oblasti termomagnetických záznamov [11,12]. Je však zrejmé, že dôležité kvantové fluktuácie sú v štatistickej mechanike isingovských mixovaných spinových modelov úplne zanedbané. Navyše, experimentálne skúmania molekulárnych magnetík (magnetizácie, magnetickej susceptibility a merného tepla) pri nenulovej teplote naznačujú, že kvantový Heisenbergov model by mohol byť lepším modelom pre kvantitatívny popis ich magnetických vlastností [13]. Hoci v publikovanej literatúre existujú práce popisujúce Isingove modely s mixovanými spinmi v transverzálnom poli [14-17], oveľa menšia pozornosť bola doteraz venovaná kvantovému Heisenbergovmu modelu s mixovanými spinmi [18-21], a to z dôvodu matematickej zložitosti riešenia problému.

Aplikácia kvantového anizotropného Heisenbergovho modelu na viacpodmriežkové magnetické štruktúry, ktorej je venovaná predložená diplomová práca, nie je triviálny problém. Konkrétne sa zaoberáme štúdiom magnetických vlastností mixovaného spinového systému, ktorý pozostáva z atómov so spinom 1 a spinom $1/2$. Pri štúdiu tohto kvantového spinového modelu započítame tak jednoiónovú, ako aj výmennú anizotropiu. Zmenou hodnoty parametra výmennej anizotropie dostaneme magnetické vlastnosti odpovedajúce izotropnému Heisenbergovmu modelu, anizotropnému Heisenbergovmu modelu

a Isingovmu modelu.

Aby sme vzali do úvahy kvantové efekty v tomto trojdimenzionálnom mixovanom spinovom systéme analyticky, je nevyhnutné použiť metódu, ktorá predstavuje vylepšenie teórie stredného poľa. Preto v tejto práci študujeme fázové diagramy a magnetické vlastnosti binárneho mixovaného spinového systému použitím Oguchiho dvojspinovej klastrovej aproximácie [22], ktorá je prirodzeným krokom za teóriu stredného poľa. V rámci tohto teoretického prístupu navrhujeme voľnú energiu v self-konzistentnom tvare, čo nám umožní určiť kompletne fázové diagramy vrátane fázových prechodov prvého druhu.

Predložená diplomová práca, okrem už prezentovaného Úvodu, je rozčlenená do ďalších štyroch kapitol. V nasledujúcej kapitole je párová Oguchiho aproximácia aplikovaná na anizotropný kvantový Heisenbergov model so zmiešanými spinmi 1 a $1/2$, pričom nájdeme úplný súbor vlastných hodnôt a vlastných vektorov pre hamiltonián uvažovaného modelu a odvodíme vzťahy pre magnetizácie a voľnú energiu. Na základe týchto vzťahov sú v 3. kapitole prezentované numerické výsledky riešenia a diskusia. V 4. kapitole, v Závere, sú zhrnuté hlavné dosiahnuté výsledky. Napokon v poslednej kapitole, Dodatkoch, sú uvedené niektoré detailnejšie matematické odvodenia.

2 Formulácia

2.1 Model

V tejto práci budeme uvažovať anizotropný kvantový Heisenbergov model so zmiešanými spinmi popísaný hamiltoniánom

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{H}} = & - \sum_{\langle i,j \rangle} J_{ij} [(1 - \Delta)(\hat{S}_{iA}^x \hat{S}_{jB}^x + \hat{S}_{iA}^y \hat{S}_{jB}^y) + \hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z] - D \sum_{i \in A} (\hat{S}_{iA}^z)^2 \\ & - h \left(\sum_{i \in A} \hat{S}_{iA}^z + \sum_{j \in B} \hat{S}_{jB}^z \right), \end{aligned} \quad (1)$$

kde index i čísľuje uzly podmriežky A obsadenej atómami so spinom 1 a index j uzly podmriežky B obsadenej atómami so spinom $1/2$, J_{ij} je parameter výmennej interakcie, Δ je parameter výmennej anizotropie, D predstavuje jednoiónovú anizotropiu (kryštálové pole) a h je vonkajšie magnetické pole v smere osi z . \hat{S}_{iA}^α ($\alpha = x, y, z$) sú operátory zložiek spinu $S_A = 1$, \hat{S}_{jB}^α operátory zložiek spinu $S_B = 1/2$ a $\langle i, j \rangle$ značí sumovanie cez najbližších susedov. Pre jednoduchosť kladieme v celej práci Planckovu konštantu $\hbar = 1$ a faktor $g\mu_B = 1$, kde g Landeho faktor a μ_B je Bohrov magnetón.

Keďže pre Heisenbergov model nie sú známe presné analytické riešenia ani pre najjednoduchšie spinové systémy, model budeme študovať použitím párovej Oguchiho aproximácie, pri ktorej rozdelíme hamiltonián (1) na dve časti, $\hat{\mathcal{H}} = \hat{\mathcal{H}}_{ij} + \hat{\mathcal{H}}'$. $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ predstavuje časť hamiltoniánu, ktorá popisuje vzájomnú interakciu dvoch najbližších susedov v i -tom a j -tom uzle a ich interakciu so stredným (efektívnym) poľom vytvoreným ostatnými najbližšími spinmi. $\hat{\mathcal{H}}'$ predstavuje zvyšnú časť hamiltoniánu, ktorá nezávisí na indexoch i a j . V našom prípade,

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij} = -J[(1 - \Delta)(\hat{S}_{iA}^x \hat{S}_{jB}^x + \hat{S}_{iA}^y \hat{S}_{jB}^y) + \hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z] - D(\hat{S}_{iA}^z)^2 - (h_i \hat{S}_{iA}^z + h_j \hat{S}_{jB}^z), \quad (2)$$

kde

$$\begin{aligned} h_i &= J(z - 1)m_B + h, \\ h_j &= J(z - 1)m_A + h \end{aligned} \quad (3)$$

sú efektívne polia pôsobiace na i -tý, resp. j -tý atóm, ktoré okrem vonkajšieho poľa h zahŕňajú aj stredné pole pochádzajúce od $(z - 1)$ najbližších susedov, pričom z je koordinačné číslo mriežky a stredné hodnoty z -ových komponent spinových operátorov $m_A = \langle \hat{S}_{iA}^z \rangle$ a $m_B = \langle \hat{S}_{jB}^z \rangle$ predstavujú podmriežkové magnetizácie.

Hamiltonián (2) si vyjadríme v maticovej reprezentácii. Keďže spin 1 má tri rôzne priemety do smeru osi z a spin 1/2 dva, celkový spin uvažovaného páru (diméru) má 6 priemetov. Preto si vyjadríme spinové operátory v tvare matíc 6×6 ich priamym súčinom s jednotkovou maticou vhodného rozmeru [23].

Operátory zložiek spinu $S = 1$ majú tvar:

$$\hat{S}_{iA}^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{iA}^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{iA}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (4)$$

Ich priamym súčinom sprava s jednotkovou maticou I_2 získame ich vyjadrenia v tvare matíc 6×6 :

$$\hat{S}_{iA}^x = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 1 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (5)$$

$$\hat{S}_{iA}^y = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 \\ i & 0 & -i \\ 0 & i & 0 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \frac{1}{\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & -i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & -i & 0 \\ 0 & i & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & i & 0 & 0 \end{pmatrix}, \quad (6)$$

$$\hat{S}_{iA}^z = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (7)$$

Operátory zložiek spinu $S_B = 1/2$ majú tvar:

$$\hat{S}_{jB}^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{jB}^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad \hat{S}_{jB}^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (8)$$

Ich priamym súčinom zľava s jednotkovou maticou I_3 získame ich vyjadrenia v tvare matíc 6×6 :

$$\hat{S}_{jB}^x = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad (9)$$

$$\hat{S}_{jB}^y = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 0 & -i & 0 & 0 & 0 & 0 \\ i & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -i & 0 & 0 \\ 0 & 0 & i & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -i \\ 0 & 0 & 0 & 0 & i & 0 \end{pmatrix}, \quad (10)$$

$$\hat{S}_{jB}^z = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \end{pmatrix} \otimes \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & -1 \end{pmatrix}. \quad (11)$$

Poznamenávame, že používame rovnaké označenie pre operátory zložiek spinu \hat{S}_{iA}^α , resp. \hat{S}_{jB}^α , nezávisle na tom, či sú reprezentované maticou 3×3 , resp. 2×2 , alebo maticou 6×6 : po fyzikálnej stránke ide o rovnaký operátor pôsobiaci iba v inom priestore stavov.

Operátory $(\hat{S}_{iA}^z)^2$ a $\hat{S}_{iA}^\alpha \hat{S}_{jB}^\alpha$ potom vyjadríme ako súčiny príslušných matíc:

$$\begin{aligned} (\hat{S}_{iA}^z)^2 &= \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}, & \hat{S}_{iA}^x \hat{S}_{jB}^x &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & 1 \\ 1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, \\ \hat{S}_{iA}^y \hat{S}_{jB}^y &= \frac{1}{2\sqrt{2}} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 & -1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & -1 \\ -1 & 0 & 0 & 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & -1 & 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}, & \hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z &= \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & -1 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & -1 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & 1 \end{pmatrix}. \end{aligned} \quad (12)$$

Pomocou takto vyjadrených operátorov zložiek spinu už možno hamiltonián (2) jednodu-

cho vyjadriť v tvare matice

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij} = \begin{pmatrix} a & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b & f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f & c & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c & f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f & d & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e \end{pmatrix}, \quad (13)$$

kde

$$\begin{aligned} a &= -\frac{J}{2} - D - h_i - \frac{h_j}{2}, \\ b &= \frac{J}{2} - D - h_i + \frac{h_j}{2}, \\ c &= -\frac{h_j}{2}, \\ d &= \frac{J}{2} - D + h_i - \frac{h_j}{2}, \\ e &= -\frac{J}{2} - D + h_i + \frac{h_j}{2}, \\ f &= -\frac{J}{\sqrt{2}}(1 - \Delta). \end{aligned} \quad (14)$$

Vlastné hodnoty E_n ($n = 1, 2, \dots, 6$) matice (13), ktoré predstavujú hladiny energie študovaného systému, a vlastné vektory (spinory) $|\psi_n\rangle$ ($n = 1, 2, \dots, 6$), ktoré popisujú základný stav systému, dostaneme riešením bezčasovej Schrödingerovej rovnice

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij}|\psi_n\rangle = E_n|\psi_n\rangle \quad (n = 1, 2, \dots, 6). \quad (15)$$

Riešenie takéhoto typu rovníc sa v lineárnej algebre označuje ako problém vlastných hodnôt [24]. V našom konkrétnom prípade sú vlastné hodnoty riešením charakteristickej rovnice

$$\det(\hat{\mathcal{H}}_{ij} - IE) = 0, \quad (16)$$

t.j. rovnice

$$\begin{vmatrix} a - E & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b - E & f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f & c - E & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c - E & f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f & d - E & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e - E \end{vmatrix} = 0, \quad (17)$$

ktorú možno písať v tvare

$$(a - E)[(b - E)(c - E) - f^2][(-c - E)(d - E) - f^2](e - E) = 0. \quad (18)$$

Táto rovnica je polynomiálnou rovnicou šiesteho stupňa pre neznámu E , ktorá sa rozpadáva na dve lineárne a dve kvadratické rovnice. Vďaka tomu možno jej riešenia vyjadriť analyticky:

$$\begin{aligned} E_1 &= a, \\ E_2 &= \frac{1}{2}(b + c) + \omega_1, \\ E_3 &= \frac{1}{2}(b + c) - \omega_1, \\ E_4 &= \frac{1}{2}(d - c) - \omega_2, \\ E_5 &= \frac{1}{2}(d - c) + \omega_2, \\ E_6 &= e, \end{aligned} \quad (19)$$

kde

$$\begin{aligned} \omega_1 &= \frac{1}{2}\sqrt{(b - c)^2 + 4f^2}, \\ \omega_2 &= \frac{1}{2}\sqrt{(d + c)^2 + 4f^2}. \end{aligned} \quad (20)$$

Keď poznáme vlastné hodnoty matice (13), môžeme vypočítať jej vlastné vektory $|\psi_n\rangle$. Tie sú reprezentované 6-rozmernými spinormi a sú riešeniami rovníc

$$(\hat{\mathcal{H}}_{ij} - IE_n)|\psi_n\rangle = |0\rangle \quad (n = 1, 2, \dots, 6), \quad (21)$$

teda rovníc

$$\begin{pmatrix} a - E_n & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & b - E_n & f & 0 & 0 & 0 \\ 0 & f & c - E_n & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & -c - E_n & f & 0 \\ 0 & 0 & 0 & f & d - E_n & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & e - E_n \end{pmatrix} \begin{pmatrix} \psi_{n1} \\ \psi_{n2} \\ \psi_{n3} \\ \psi_{n4} \\ \psi_{n5} \\ \psi_{n6} \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad (22)$$

pre $n = 1, 2, \dots, 6$. Z matematického hľadiska ide o sústavu 6 homogénnych lineárnych rovníc o šiestich neznámých ψ_{nk} ($k = 1, 2, \dots, 6$), t.j. rovníc

$$\begin{aligned} (a - E_n)\psi_{n1} &= 0, \\ (b - E_n)\psi_{n2} + f\psi_{n3} &= 0, \\ f\psi_{n2} + (c - E_n)\psi_{n3} &= 0, \\ (-c - E_n)\psi_{n4} + f\psi_{n5} &= 0, \\ f\psi_{n4} + (d - E_n)\psi_{n5} &= 0, \\ (e - E_n)\psi_{n6} &= 0. \end{aligned} \quad (23)$$

Keďže $\det(\hat{\mathcal{H}}_{ij} - IE) = 0$, ide o systém lineárne závislých rovníc, ktorý má nekonečne veľa riešení. Jednoznačné riešenia nájdeme až po aplikácii podmienky ortonormovanosti $\langle \psi_m | \psi_n \rangle = \delta_{mn}$, ktorú musia vlastné vektory spĺňať.

Pre prípad $n = 1$ ($E_1 = a$) možno riešenie sústavy (23) písať v tvare

$$\psi_{11} = C \neq 0, \quad \psi_{12} = 0, \quad \psi_{13} = 0, \quad \psi_{14} = 0, \quad \psi_{15} = 0, \quad \psi_{16} = 0. \quad (24)$$

Konštantu C určíme pomocou normalizačnej podmienky $\langle \psi_1 | \psi_1 \rangle = 1$:

$$\psi_{11} = 1. \quad (25)$$

Podobne postupujeme aj pre $n = 6$ ($E_6 = e$) a nájdeme, že

$$\psi_{61} = 0, \quad \psi_{62} = 0, \quad \psi_{63} = 0, \quad \psi_{64} = 0, \quad \psi_{65} = 0, \quad \psi_{66} = 1. \quad (26)$$

Teda tieto vektory majú tvar

$$|\psi_1\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_6\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (27)$$

Výpočet ostatných vlastných vektorov je menej triviálny a ukážeme si ho na prípade $n = 2$ ($E_2 = \frac{1}{2}(b + c) + \omega_1$). Sústava (23) sa v tomto prípade redukuje na tvar

$$\begin{aligned} \psi_{21} &= 0, \\ \left[b - \frac{1}{2}(b + c) - \omega_1 \right] \psi_{22} + f\psi_{23} &= 0, \\ f\psi_{22} + \left[c - \frac{1}{2}(b + c) - \omega_1 \right] \psi_{23} &= 0, \\ \psi_{24} &= 0, \\ \psi_{25} &= 0, \\ \psi_{26} &= 0. \end{aligned} \quad (28)$$

V ďalšom teda stačí uvažovať 2. a 3. rovnicu:

$$\begin{aligned} \left[\frac{1}{2}(b - c) - \omega_1 \right] \psi_{22} + f\psi_{23} &= 0, \\ f\psi_{22} - \left[\frac{1}{2}(b - c) + \omega_1 \right] \psi_{23} &= 0. \end{aligned} \quad (29)$$

Z 1. rovnice si vyjadríme člen ψ_{23} :

$$\psi_{23} = -\frac{1}{f} \left[\frac{1}{2}(b - c) - \omega_1 \right] \psi_{22}. \quad (30)$$

Dosadením tohto výrazu do 2. rovnice nedostaneme riešenie, pretože obe rovnice sú lineárne závislé, preto využijeme normalizačnú podmienku $\langle \psi_2 | \psi_2 \rangle = 1$, ktorá má teraz tvar

$$\psi_{22}^2 + \psi_{23}^2 = 1. \quad (31)$$

Po dosadení (30) do normalizačnej podmienky (31) dostaneme rovnicu

$$\psi_{22}^2 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]^2 \psi_{22}^2 = 1. \quad (32)$$

Riešením tejto rovnice je

$$\psi_{22} = \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]^2}}, \quad (33)$$

čo po dosadení do (30) dáva pre ψ_{23} riešenie v tvare

$$\psi_{23} = -\frac{\frac{1}{f} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]}{\sqrt{1 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]^2}}. \quad (34)$$

Podobým spôsobom spočítame aj vlastné vektory $|\psi_3\rangle$, $|\psi_4\rangle$ a $|\psi_5\rangle$.

Ak zavedieme označenia

$$\begin{aligned} x &= \frac{\frac{1}{f} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]}{\sqrt{1 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]^2}}, \\ y &= \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(b-c) - \omega_1 \right]^2}}, \\ x' &= \frac{1}{\sqrt{1 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(d+c) - \omega_2 \right]^2}}, \\ y' &= \frac{\frac{1}{f} \left[\frac{1}{2}(d+c) - \omega_2 \right]}{\sqrt{1 + \frac{1}{f^2} \left[\frac{1}{2}(d+c) - \omega_2 \right]^2}}, \end{aligned} \quad (35)$$

môžeme zapísať ich elementy ako

$$\begin{aligned} \psi_{21} &= 0, & \psi_{22} &= y, & \psi_{23} &= -x, & \psi_{24} &= 0, & \psi_{25} &= 0, & \psi_{26} &= 0, \\ \psi_{31} &= 0, & \psi_{32} &= x, & \psi_{33} &= y, & \psi_{34} &= 0, & \psi_{35} &= 0, & \psi_{36} &= 0, \\ \psi_{41} &= 0, & \psi_{42} &= 0, & \psi_{43} &= 0, & \psi_{44} &= x', & \psi_{45} &= y', & \psi_{46} &= 0, \\ \psi_{51} &= 0, & \psi_{52} &= 0, & \psi_{53} &= 0, & \psi_{54} &= -y', & \psi_{55} &= x', & \psi_{56} &= 0. \end{aligned} \quad (36)$$

Teda tieto vektory majú tvar

$$|\psi_2\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ y \\ -x \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_3\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ x \\ y \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_4\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ x' \\ y' \\ 0 \end{pmatrix}, \quad |\psi_5\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ -y' \\ x' \\ 0 \end{pmatrix}. \quad (37)$$

Ak zavedieme tzv. Isingovu bázu (pozri dodatok 5.1), vidíme, že vektory $|\psi_n\rangle$ sú vyjadrené v tvare rozvoja podľa vektorov tejto bázy:

$$\begin{aligned} |\psi_1\rangle &= |\varphi_1\rangle \equiv |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\ |\psi_2\rangle &= y|\varphi_2\rangle - x|\varphi_3\rangle \equiv y|1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j - x|1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\ |\psi_3\rangle &= x|\varphi_2\rangle + y|\varphi_3\rangle \equiv x|1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j + y|1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\ |\psi_4\rangle &= x'|\varphi_4\rangle + y'|\varphi_5\rangle \equiv x'|1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j + y'|1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\ |\psi_5\rangle &= -y'|\varphi_4\rangle + x'|\varphi_5\rangle \equiv -y'|1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j + x'|1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\ |\psi_6\rangle &= |\varphi_6\rangle \equiv |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j. \end{aligned} \quad (38)$$

Na záver tejto časti poznamenávame, že hamiltonián $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ možno vyjadriť v maticovej reprezentácii aj pomocou vopred zadanej bázy ortonormovaných vektorov, ako je ukázané v dodatku 5.2.

2.2 Termodynamické vlastnosti modelu

Aby sme mohli študovať termodynamické vlastnosti modelu, potrebujeme vyjadriť partičnú funkciu danú vzťahom

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}[\exp(-\beta\hat{\mathcal{H}}_{ij})], \quad (39)$$

kde $\beta = 1/(k_B T)$, pričom k_B predstavuje Boltzmannovu konštantu. Pomocou známych vlastných hodnôt hamiltoniánu (13) možno partičnú funkciu vyjadriť v tvare

$$\begin{aligned}\mathcal{Z} &= \sum_{n=1}^6 \exp(-\beta E_n) \\ &= \exp(-\beta a) + \exp(-\beta e) + 2 \exp\left(-\frac{\beta}{2}(b+c)\right) \cosh(\beta\omega_1) \\ &\quad + 2 \exp\left(-\frac{\beta}{2}(d-c)\right) \cosh(\beta\omega_2).\end{aligned}\tag{40}$$

Podmriežkové magnetizácie m_A a m_B môžeme podľa definície termodynamickej strednej hodnoty vypočítať nasledovne:

$$\begin{aligned}m_A &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}[\hat{S}_{iA}^z \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{ij})] = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial (\beta h_i)} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \left[\exp(-\beta a) - \exp(-\beta e) \right. \\ &\quad + \exp\left(-\frac{\beta}{2}(b+c)\right) \left(\cosh(\beta\omega_1) - \frac{b-c}{2\omega_1} \sinh(\beta\omega_1) \right) \\ &\quad \left. - \exp\left(-\frac{\beta}{2}(d-c)\right) \left(\cosh(\beta\omega_2) - \frac{d+c}{2\omega_2} \sinh(\beta\omega_2) \right) \right]\end{aligned}\tag{41}$$

a

$$\begin{aligned}m_B &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}[\hat{S}_{jB}^z \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{ij})] = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial (\beta h_j)} \\ &= \frac{1}{2\mathcal{Z}} \left[\exp(-\beta a) - \exp(-\beta e) + \exp\left(-\frac{\beta}{2}(b+c)\right) \frac{b-c}{\omega_1} \sinh(\beta\omega_1) \right. \\ &\quad \left. - \exp\left(-\frac{\beta}{2}(d-c)\right) \frac{d+c}{\omega_2} \sinh(\beta\omega_2) \right].\end{aligned}\tag{42}$$

Celková magnetizácia je potom daná vzťahom

$$m = \frac{m_A + m_B}{2}.\tag{43}$$

Aby sme určili fázové prechody prvého druhu, potrebujeme vyjadriť voľnú energiu \mathcal{F} , ktorá umožní rozlíšiť stabilnú fázu od metastabilných fáz, ktoré sa pri fázových prechodoch tohto druhu vyskytujú. Voľnú energiu v Oguchiho aproximácii pre uvažovaný mixovaný spinový systém navrhujeme v tvare

$$\mathcal{F} = -k_B T \ln \mathcal{Z} + J(z-1)m_A m_B.\tag{44}$$

Voľná energia ako funkcia m_A a m_B musí mať minimum v stave termodynamickkej rovnováhy, teda musia platiť podmienky

$$\frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m_A} = 0, \quad \frac{\partial \mathcal{F}}{\partial m_B} = 0. \quad (45)$$

Lahko sa presvedčíme, že pre voľnú energiu vyjadrenú v tvare (44) tieto podmienky vedú k rovnovážnym hodnotám podmriežkových magnetizácií daných vzťahmi (41) a (42).

Z partičnej funkcie (40) môžeme odvodiť aj ďalšie veličiny charakterizujúce stav systému: kvadrupólový moment podmriežky A a korelačné funkcie:

Kvadrupólový moment podmriežky A definovaný ako $q_A = \langle (\hat{S}_{iA}^z)^2 \rangle$ vypočítame ako

$$\begin{aligned} q_A &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}[(\hat{S}_{iA}^z)^2 \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{ij})] = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial (\beta D)} \\ &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \left[\exp(-\beta a) + \exp(-\beta e) \right. \\ &\quad + \exp\left(-\frac{\beta}{2}(b+c)\right) \left(\cosh(\beta \omega_1) - \frac{b-c}{2\omega_1} \sinh(\beta \omega_1) \right) \\ &\quad \left. + \exp\left(-\frac{\beta}{2}(d-c)\right) \left(\cosh(\beta \omega_2) - \frac{d+c}{2\omega_2} \sinh(\beta \omega_2) \right) \right]. \end{aligned} \quad (46)$$

Korelačnú funkciu $C_{ij}^{zz} = \langle \hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z \rangle$ vypočítame ako

$$\begin{aligned} C_{ij}^{zz} &= \frac{1}{\mathcal{Z}} \text{Tr}[\hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{ij})] = \frac{1}{\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial (\beta J)} \\ &= \frac{1}{2\mathcal{Z}} \left[\exp(-\beta a) + \exp(-\beta e) \right. \\ &\quad - \exp\left(-\frac{\beta}{2}(b+c)\right) \left(\cosh(\beta \omega_1) - \frac{(b-c) - 4\sqrt{2}f(1-\Delta)}{2\omega_1} \sinh(\beta \omega_1) \right) \\ &\quad \left. - \exp\left(-\frac{\beta}{2}(d-c)\right) \left(\cosh(\beta \omega_2) - \frac{(d+c) - 4\sqrt{2}f(1-\Delta)}{2\omega_2} \sinh(\beta \omega_2) \right) \right] \end{aligned} \quad (47)$$

a korelačnú funkciu $C_{ij}^{xy} = \frac{1}{2} \langle \hat{S}_{iA}^x \hat{S}_{jB}^x + \hat{S}_{iA}^y \hat{S}_{jB}^y \rangle$ vypočítame ako

$$\begin{aligned} C_{ij}^{xy} &= \frac{1}{2\mathcal{Z}} \text{Tr}[(\hat{S}_{iA}^x \hat{S}_{jB}^x + \hat{S}_{iA}^y \hat{S}_{jB}^y) \exp(-\beta \hat{\mathcal{H}}_{ij})] = \frac{1}{2\mathcal{Z}} \frac{\partial \mathcal{Z}}{\partial [\beta J(1-\Delta)]} \\ &= -\frac{f}{\sqrt{2}\mathcal{Z}} \left[\exp\left(-\frac{\beta}{2}(b+c)\right) \frac{\sinh(\beta \omega_1)}{\omega_1} + \exp\left(-\frac{\beta}{2}(d-c)\right) \frac{\sinh(\beta \omega_2)}{\omega_2} \right]. \end{aligned} \quad (48)$$

2.3 Kritické vlastnosti modelu

Aby sme určili kritické vlastnosti nášho systému, rozvinieme magnetizáciu m_B do radu podľa mocnín m_B do tretieho rádu okolo bodu $m_B = 0$:

$$m_B = c_1 m_B + c_2 m_B^3 + \dots, \quad (49)$$

príčom koeficienty c_1 a c_2 určíme nasledujúcim iteračným postupom:

Aby sme našli koeficient c_1 tohto rozvoja, rozvinieme do radu obe podmriežkové magnetizácie (41) a (42) do členov prvého rádu:

$$m_A = a_1 m_A + a_2 m_B + \dots, \quad (50)$$

$$m_B = b_1 m_A + b_2 m_B + \dots \quad (51)$$

Z rovnice (50) máme

$$(1 - a_1)m_A = a_2 m_B, \quad (52)$$

čo dosadením do rovnice (51) dáva

$$m_B = \frac{b_1 a_2}{(1 - a_1)} m_B + b_2 m_B + \dots \quad (53)$$

Porovnaním s (49) dostaneme pre c_1 vyjadrenie

$$c_1 = b_2 + \frac{a_2 b_1}{1 - a_1}. \quad (54)$$

Podobne, aby sme našli koeficient c_2 , rozvinieme do radu obe podmriežkové magnetizácie do členov tretieho rádu:

$$m_A = a_1 m_A + a_2 m_B + a_3 m_A m_B^2 + a_4 m_A^2 m_B + a_5 m_A^3 + a_6 m_B^3 + \dots, \quad (55)$$

$$m_B = b_1 m_A + b_2 m_B + b_3 m_A m_B^2 + b_4 m_A^2 m_B + b_5 m_A^3 + b_6 m_B^3 + \dots \quad (56)$$

Napokon dosadením rovnice (52) do (55) dostaneme:

$$(1 - a_1)m_A = a_2 m_B + \left[\frac{a_2 a_3}{1 - a_1} + \frac{a_2^2 a_4}{(1 - a_1)^2} + \frac{a_2^3 a_5}{(1 - a_1)^3} + a_6 \right] m_B^3. \quad (57)$$

Dosadením (57) do (56), s obmedzením sa iba na členy do tretieho rádu vzhľadom na m_B^3 , získame výraz pre c_2 :

$$c_2 = b_6 + \frac{1}{1-a_1} \left[a_2 b_3 + a_6 b_1 + \frac{a_2}{1-a_1} (a_2 b_4 + a_3 b_1) + \left(\frac{a_2}{1-a_1} \right)^2 (a_2 b_5 + a_4 b_1) + \left(\frac{a_2}{1-a_1} \right)^3 a_5 b_1 \right], \quad (58)$$

pričom explicitný tvar koeficientov a_k, b_k ($k = 1, 2, \dots, 6$) je uvedený v Dodatku 5.3.

Na základe Landauovej teórie fázových prechodov [25] je fázový prechod druhého druhu určený podmienkami

$$c_1 = 1, \quad c_2 < 0. \quad (59)$$

V prípade, že koeficient c_2 mení znamienko, fázový prechod druhého druhu sa zmení na fázový prechod prvého druhu. Bod, v ktorom táto zmena nastáva, sa nazýva trikritický bod, a je teda určený podmienkami

$$c_1 = 1, \quad c_2 = 0. \quad (60)$$

K rovnakým záverom dospejeme aj v prípade, ak rozvineme do radu magnetizáciu m_A :

$$m_A = d_1 m_A + d_2 m_A^3 + \dots \quad (61)$$

Rovnakým postupom ako v prípade rozvoja podmriežkovej magnetizácie m_B (42) dostaneme, že koeficienty d_1 a d_2 sú určené vzťahmi

$$d_1 = a_1 + \frac{a_2 b_1}{1-b_2}, \quad (62)$$

$$d_2 = a_5 + \frac{1}{1-b_2} \left[a_2 b_5 + a_4 b_1 + \frac{b_1}{1-b_2} (a_2 b_4 + a_3 b_1) + \left(\frac{b_1}{1-b_2} \right)^2 (a_2 b_3 + a_6 b_1) + \left(\frac{b_1}{1-b_2} \right)^3 a_2 b_6 \right]. \quad (63)$$

Fázový prechod druhého druhu je teraz určený podmienkami

$$d_1 = 1, \quad d_2 < 0 \quad (64)$$

a trikritický bod dostaneme zo vzťahov

$$d_1 = 1, \quad d_2 = 0. \quad (65)$$

Ľahko možno dokázať, že rovnice (59) a (64), resp. (60) a (65), sú navzájom ekvivalentné, a teda dávajú rovnakú hodnotu pre teplotu fázového prechodu druhého druhu a trikritický bod.

Fázový prechod prvého druhu dostaneme porovnaním voľných energií oboch rôznych fáz, ktoré sú v bode fázového prechodu prvého druhu vo vzájomnej rovnováhe.

2.4 Základný stav

Aby sme mohli identifikovať jednotlivé fázy, ktoré sa pre daný systém realizujú, potrebujeme poznať ich spinové usporiadanie pri nulovej teplote, t.j. základný stav. Ten je pre dané parametre Δ , J , D a h jednoznačne určený vlastným vektorom prislúchajúcim minimálnej vnútornej energii. Podmriežkové magnetizácie m_{Ak} a m_{Bk} pre $T = 0$ K prislúchajúce stavu $|\psi_k\rangle$ potom vypočítame podľa nasledovného postupu:

Strednú hodnotu ľubovoľného lineárneho hermitovského operátora \hat{A} v stave popísanom vlastným vektorom $|\psi_k\rangle$ vypočítame ako

$$\langle \hat{A} \rangle_k = \langle \psi_k | \hat{A} | \psi_k \rangle. \quad (66)$$

Podmriežkové magnetizácie pri nulovej teplote v stave $|\psi_k\rangle$ sú teda určené vzťahmi

$$\begin{aligned} m_{Ak} &\equiv \langle \hat{S}_{iA}^z \rangle_k = \langle \psi_k | \hat{S}_{iA}^z | \psi_k \rangle, \\ m_{Bk} &\equiv \langle \hat{S}_{jB}^z \rangle_k = \langle \psi_k | \hat{S}_{jB}^z | \psi_k \rangle, \end{aligned} \quad (67)$$

kde za operátory \hat{S}_{iA}^z , resp. \hat{S}_{jB}^z , dosadíme ich reprezentácie v tvare matíc 6×6 (7), resp. (11). Pre jednotlivé fázy $|\psi_k\rangle$ ($k = 1, 2, \dots, 6$) ich možno s použitím označenia (35) písať v tvare

$$\begin{aligned} m_{A1} &= 1, & m_{B1} &= \frac{1}{2}, \\ m_{A2} &= y^2, & m_{B2} &= \frac{1}{2}(x^2 - y^2), \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
m_{A3} &= x^2, & m_{B3} &= \frac{1}{2}(y^2 - x^2), \\
m_{A4} &= x'^2, & m_{B4} &= \frac{1}{2}(y'^2 - x'^2), \\
m_{A5} &= y'^2, & m_{B5} &= \frac{1}{2}(x'^2 - y'^2), \\
m_{A6} &= -1, & m_{B6} &= -\frac{1}{2}.
\end{aligned} \tag{68}$$

Poznamenávame, že pre prípad $\Delta = 1$ (Isingov model) je $f = 0$, a teda platí $x = 0$, $y = 1$, $x' = 1$ a $y' = 0$ (pozri vzťahy (14) a (35)). Vektory bázy (38) sa redukujú na vektory Isingovej bázy (82):

$$|\psi_k\rangle = |\varphi_k\rangle, \quad (k = 1, 2, \dots, 6). \tag{69}$$

Pre Isingov model pri nulovej teplote nadobúdajú podmriežkové magnetizácie hodnôt

$$\begin{aligned}
m_{A1} &= m_{A2} = 1, \\
m_{A3} &= m_{A4} = 0, \\
m_{A5} &= m_{A6} = -1, \\
m_{B1} &= m_{B3} = m_{B5} = \frac{1}{2}, \\
m_{B2} &= m_{B4} = m_{B6} = -\frac{1}{2}.
\end{aligned} \tag{70}$$

Jednotlivé fázy, charakterizované rôznymi hodnotami podmriežkových magnetizácií, odlišíme numerickým porovnaním hodnôt vnútorných energií, z ktorých vyberieme vždy najmenšiu, ktorá zodpovedá stabilnému stavu. Body, v ktorých sa vnútorné energie dvoch fáz rovnajú, potom závisia na hodnote jednoiónovej anizotropie D a predstavujú fázové prechody prvého druhu pri nulovej teplote.

3 Numerické výsledky a diskusia

V ďalšom sa obmedzíme na prípad jednoduchej kubickej mriežky, keď koordinačné číslo je $z = 6$, a na prípady, keď $J > 0$, čo odpovedá feromagnetickú výmennej interakcii.

Fázové diagramy pre rôzne hodnoty parametrov výmennej a jednoiónovej anizotropie sú znázornené na obr. 2-4 a obr. 6. Plné, resp. prerušované, čiary predstavujú fázové prechody druhého, resp. prvého druhu. Prázdny krúžkami sú znázornené polohy izolovaných kritických bodov, v ktorých zaniká krivka fázových prechodov prvého druhu. Plnými krúžkami sú znázornené polohy trikritickej bodov, v ktorých prechádza krivka fázových prechodov druhého druhu do krivky fázových prechodov prvého druhu. Súradnice trikritickej bodov pre niektoré prípady sú uvedené v tab. 1. Priemet krivky trikritickej bodov pozdĺž osi parametra výmennej anizotropie Δ je znázornený na obr. 1.

Δ	D_t/J	$k_B T_t/J$	Δ	D_t/J	$k_B T_t/J$
0.0	-2.7116	1.21516	0.6	-2.7945	1.26706
0.1	-2.7304	1.22740	0.7	-2.8014	1.27115
0.2	-2.7473	1.23806	0.8	-2.8063	1.27407
0.3	-2.7621	1.24732	0.9	-2.8092	1.27580
0.4	-2.7749	1.25517	1.0	-2.8102	1.27643
0.5	-2.7857	1.26174			

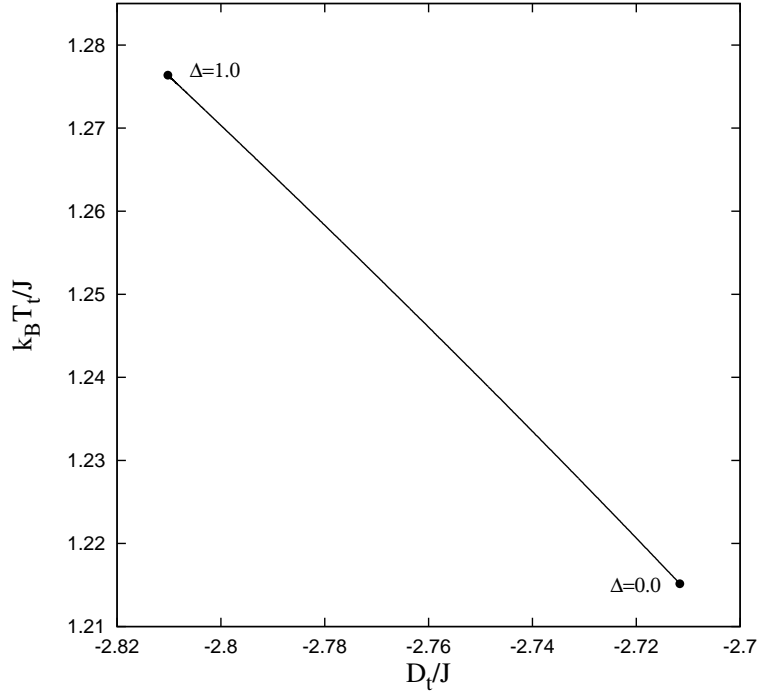
Tab. 1: Súradnice trikritickej bodov v rovine (D, T) pre rôzne hodnoty parametra Δ .

Z tab. 1 vidíme, že pri prechode od Isingovho modelu ($\Delta = 1$) k izotropnému Heisenbergovmu modelu ($\Delta = 0$) sa hodnota D_t/J zvýši o 3.51% a hodnota $k_B T_t/J$ zníži o 4.8%.

3.1 Isingov model ($\Delta = 1$)

Pre hodnotu parametra výmennej anizotropie $\Delta = 1$ sa hamiltonián (2) redukuje na tvar

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij}^{Ising} = -J \hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z - D (\hat{S}_{iA}^z)^2 - (h_i \hat{S}_{iA}^z + h_j \hat{S}_{jB}^z), \quad (71)$$



Obr. 1: Priemet krivky trikritických bodov pozdĺž osi parametra Δ .

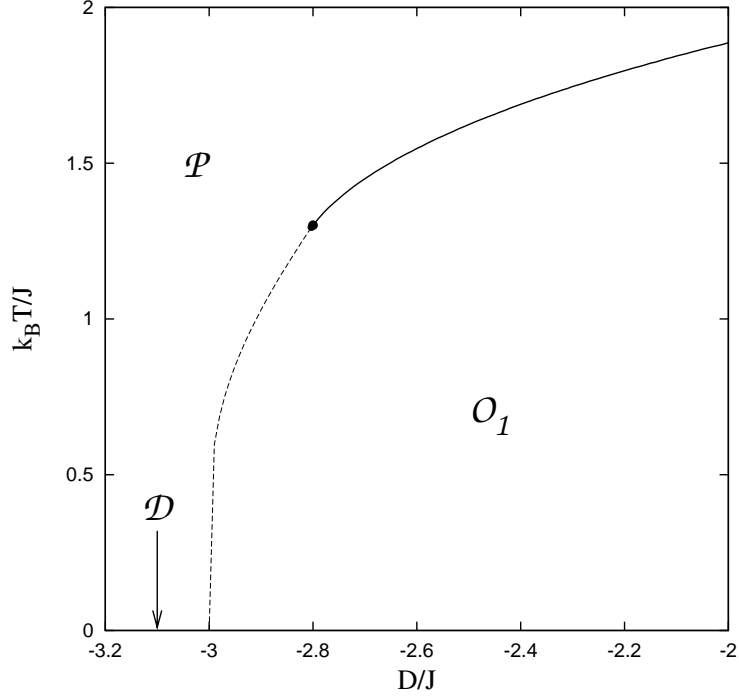
ktorý predstavuje Isingov model. Pretože v tomto prípade je $f = 0$, v maticovej reprezentácii je tento hamiltonián reprezentovaný diagonálnou maticou. Teda jeho vlastné hodnoty sú diagonálne elementy a, b, \dots, e (14) a jeho vlastné vektory sú vektory Isingovej bázy (82).

Fázový diagram pre tento model je znázornený na obr. 2. Krivka fázových prechodov prvého druhu zaniká pre $T = 0$ K a oddeľuje od seba usporiadanú fázu, ktorú označíme ako fáza \mathcal{O}_1 , a neusporiadanú fázu \mathcal{D} .

Kritickú hodnotu jednoiónovej anizotropie D_c , pri ktorej nastáva fázový prechod medzi týmito fázami, dostaneme porovnaním vnútorných energií oboch fáz, ktoré musia byť v bode fázového prechodu vo vzájomnej rovnováhe.

Vyjdime z hamiltoniánu (1), ktorý sa pre prípad Isingovho modelu v nulovom vonkajšom poli redukuje na tvar

$$\hat{\mathcal{H}}^{Ising} = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z - D \sum_{i \in A} (\hat{S}_{iA}^z)^2. \quad (72)$$



Obr. 2: Fázový diagram pre $\Delta = 1$ (Isingov model).

Vnútrošnú energiu \mathcal{U}_1 usporiadanej fázy \mathcal{O}_1 , v ktorej sú všetky spiny podmriežky A v stave $+1$ (alebo v stave -1) a všetky spiny podmriežky B v stave $+1/2$ (alebo v stave $-1/2$), môžeme vypočítať ako

$$\mathcal{U}_1 = \langle \hat{\mathcal{H}}^{Ising} \rangle_{\mathcal{O}_1} = -\frac{JNz}{4} - \frac{DN}{2}, \quad (73)$$

kde N je celkový počet atómov v mriežke. Vnútrošnú energiu \mathcal{U}_D neusporiadanej fázy \mathcal{D} , v ktorej sú spiny podmriežky A v stave 0 a spiny podmriežky B s rovnakou pravdepodobnosťou v stave $+1/2$ a $-1/2$ môžeme vyjadriť ako

$$\mathcal{U}_D = \langle \hat{\mathcal{H}}^{Ising} \rangle_{\mathcal{D}} = 0. \quad (74)$$

Z podmienky $\mathcal{U}_1 = \mathcal{U}_D$ dostaneme pre kritickú hodnotu jednoiónovej anizotropie exaktnú hodnotu $D_c/J = -z/2$.

Ak vyjdeme z párového hamiltoniánu (71), dostaneme pre vnútrošnú energiu \mathcal{U}_1

$$\mathcal{U}_1 = \langle \hat{\mathcal{H}}_{ij}^{Ising} \rangle_{\mathcal{O}_1} = -\frac{J}{2} - D - J(z-1) \quad (75)$$

a pre energiu $\mathcal{U}_{\mathcal{D}}$

$$\mathcal{U}_{\mathcal{D}} = \langle \hat{\mathcal{H}}_{ij}^{Ising} \rangle_{\mathcal{D}} = 0. \quad (76)$$

Porovnaním týchto dvoch vnútorných energií dostaneme $D_c/J = 1/2 - z$, čo nie je v súlade s exaktným riešením, ani s fázovým diagramom na obr. 2.

Aby sme získali hodnotu D_c konzistentnú s exaktným riešením, definujme vnútornú energiu pre $T = 0$ K vzťahom

$$\mathcal{U}_k = \langle \hat{\mathcal{H}}_{ij}^{Ising} \rangle_k + J(z-1)m_{Ak}m_{Bk}. \quad (77)$$

Lahko sa presvedčíme, že s takto definovanou vnútornou energiou dostaneme pre kritickú jednoiónovú anizotropiu správnu hodnotu $D_c/J = -z/2$. Toto vyjadrenie vnútornej energie neskôr zovšeobecníme aj na prípad Heisenbergovho modelu.

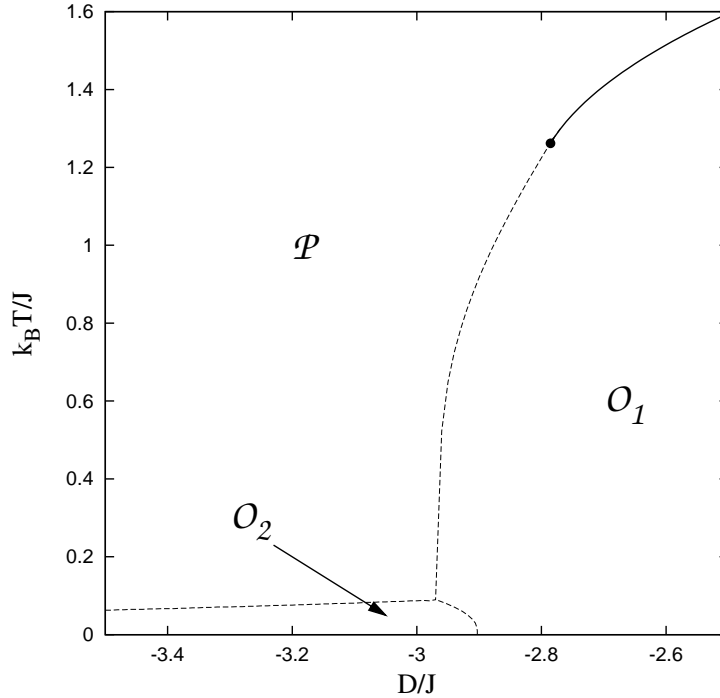
O spinovom usporiadaní fáz \mathcal{O}_1 a \mathcal{D} pri nulovej teplote, ktoré sme použili pri výpočte kritickej hodnoty jednoiónovej anizotropie, sa možno presvedčiť pomocou vlastných vektorov hamiltoniánu, ktoré popisujú systém v základnom stave.

Fáza $|\varphi_k\rangle$, ktorá sa pre dané parametre Δ a D v základnom stave realizuje, je tá, ktorá má najnižšiu vnútornú energiu (77). Numerickým porovnaním vnútorných energií zistíme, že pre $D/J > -z/2$ sa realizuje fáza popísaná vlastným vektorom $|\varphi_1\rangle$, ktorá predstavuje paralelné usporiadanie všetkých spinov, a teda feromagnetickú fázu. Pre $D/J < -z/2$ majú zhodne najnižšiu vnútornú energiu fázy popísané vektormi $|\varphi_3\rangle$ a $|\varphi_4\rangle$. V oboch týchto fázach je priemet spinu atómov podmriežky A do osi z nulový a priemet spinu atómov podmriežky B do z -ovej osi je pre fázy $|\varphi_3\rangle$ a $|\varphi_4\rangle$ rovný $+1/2$, resp $-1/2$ (pozri vzťahy (70)), a preto celková magnetizácia je nulová.

Pre $T > 0$ K prechádza neusporiadaná fáza \mathcal{D} do paramagnetickej fázy \mathcal{P} , v ktorej sa náhodným spôsobom s rovnakou pravdepodobnosťou realizujú všetky stavy $|\varphi_k\rangle$ ($k = 1, 2, \dots, 6$), čo odpovedá situácii, keď sa s rovnakou pravdepodobnosťou realizujú všetky priemety spinov do smeru z -ovej osi. Preto je celková magnetizácia v tejto fáze tiež nulová.

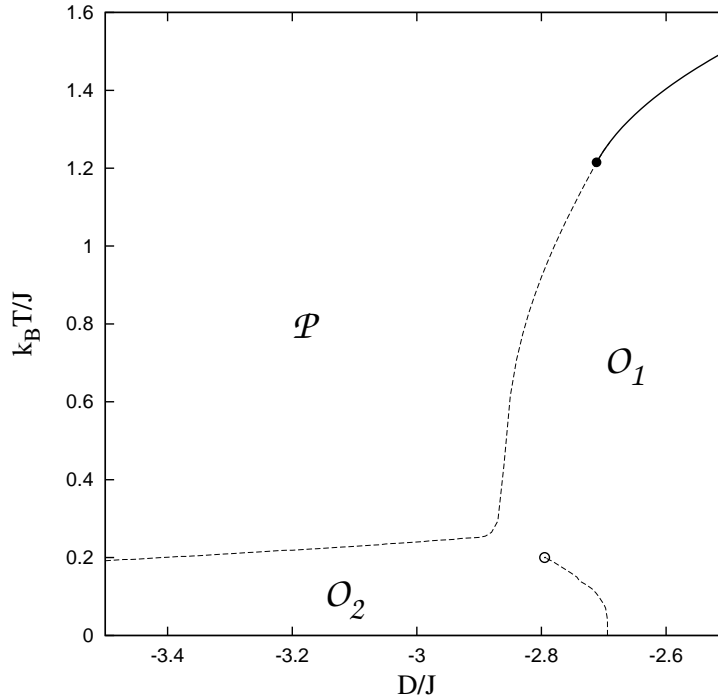
3.2 Heisenbergov model

Inú topológiu ako v prípade Isingovho modelu majú fázové diagramy pre $0 \leq \Delta < 1$, čo je ilustrované na obr. 3 a 4, ktoré znázorňujú fázové diagramy pre $\Delta = 0.5$ (anizotropný Heisenbergov model) a $\Delta = 0$ (izotropný Heisenbergov model). Na týchto diagramoch krivka fázových prechodov prvého druhu nezaniká pre $T = 0$ K a objavuje sa nová nízko-teplotná usporiadaná fáza, ktorú označíme \mathcal{O}_2 . Táto fáza je od usporiadanej fázy \mathcal{O}_1 oddelená krivkou fázových prechodov prvého druhu, ktorá môže byť zakončená izolovaným kritickým bodom, ako je ilustrované na obr. 4. Na tejto krivke obe usporiadané fázy koexistujú a v izolovanom kritickom bode sa stávajú nerozlíšiteľnými (majú rovnakú magnetizáciu).



Obr. 3: Fázový diagram pre $\Delta = 0.5$ (anizotropný Heisenbergov model).

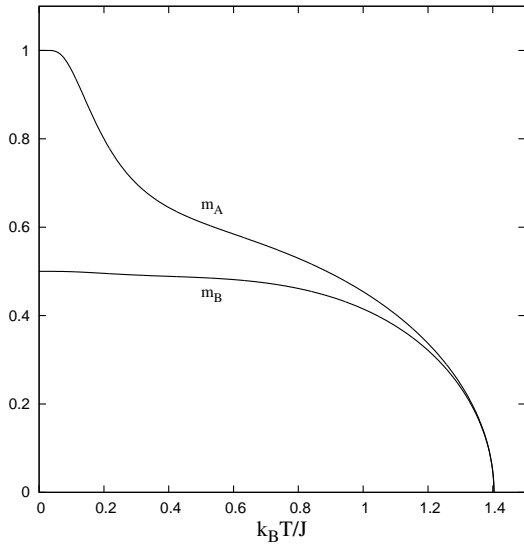
Existenciu dvoch usporiadaných fáz pri nenulovej teplote, ako aj fázové prechody prvého a druhého druhu možno ilustrovať na teplotných závislostiach podmriežkových magnetizácií pre typické hodnoty parametra jednoiónovej anizotropie D . Na obr. 5(a)-5(d) sú znázornené niektoré prípady pre $\Delta = 0$. Na obr. 5(a) pre prípad $D/J = -2.6$ obe



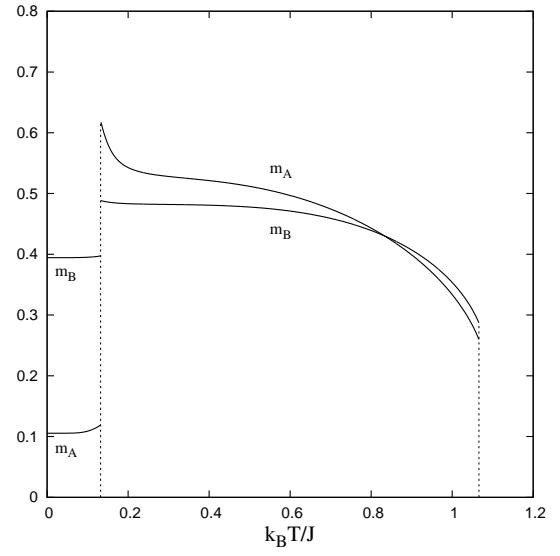
Obr. 4: Fázový diagram pre $\Delta = 0$ (izotropný Heisenbergov model).

podmriežkové magnetizácie spojito zanikajú v kritickej teplote, čo je typické pre fázový prechod druhého druhu. obr. 5(b) znázorňuje prípad $D/J = -2.76$, na ktorom sa pri nízkych teplotách objavuje fáza \mathcal{O}_2 , a teda vidíme, že magnetizácie vykazujú v dvoch teplotách nespojitost' typickú pre fázový prechod prvého druhu. Hodnota $D/J = -2.8$ na obr. 5(c) odpovedá prípadu blízko izolovaného kritického bodu, keď zaniká rozdiel medzi usporiadanými fázami \mathcal{O}_1 a \mathcal{O}_2 a podmriežkové magnetizácie zanikajú nespojito vo vysokoteplotnom fázovom prechode prvého druhu. Nakoniec obr. 5(d) znázorňuje prípad $D/J = -2.9$, kde vykazujú magnetizácie nespojitost' v jednej kritickej teplote. Vidíme teda, že správanie sa magnetizácií je v každom prípade v úplnom súlade s fázovým diagramom na obr. 4.

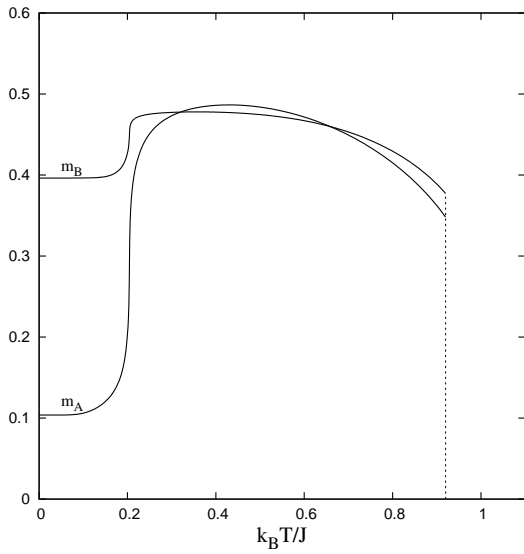
Aby sme videli vplyv parametra výmennej anizotropie Δ na kritickú teplotu systému, na obr. 6 sú znázornené fázové diagramy v rovine (Δ, T) pre rôzne hodnoty jednoiónovej anizotropie D . Ako vidíme, s rastúcou hodnotou Δ stúpa kritická teplota pre fázu \mathcal{O}_1 (pozri priebehy kriviek pre $D/J = -2.75$ a $D/J = -2.8$). Kritická teplota pre fázu \mathcal{O}_2 ,



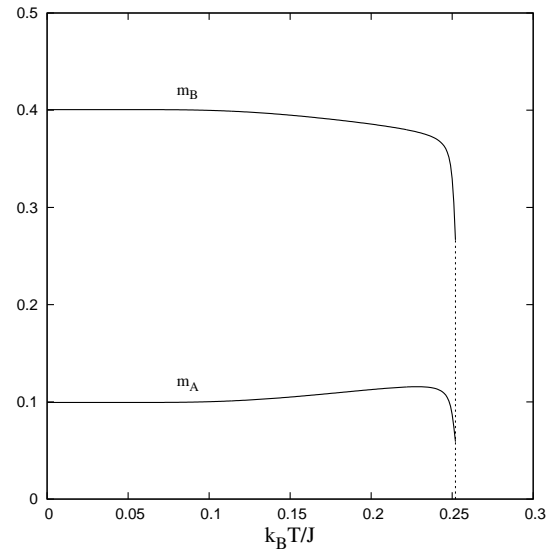
(a)



(b)



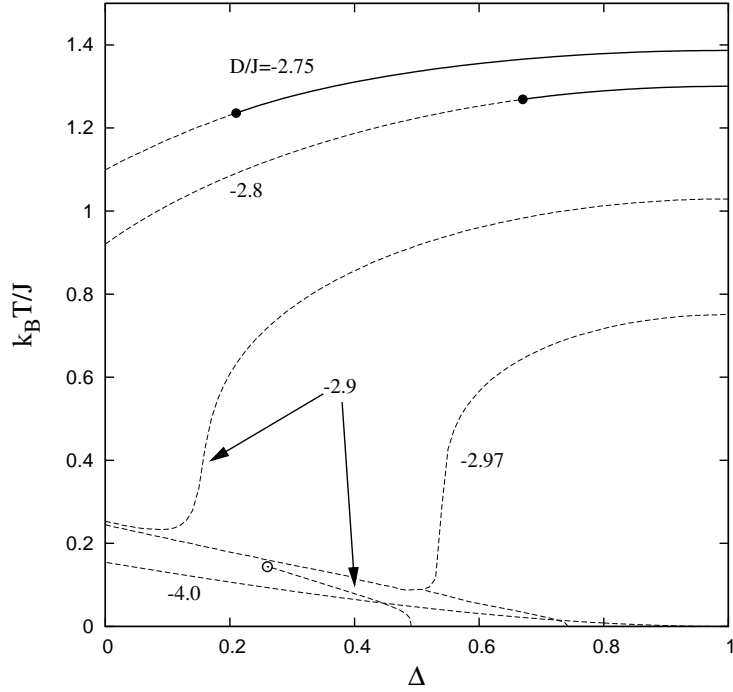
(c)



(d)

Obr. 5: Teplotná závislosť podmriežkových magnetizácií pre rôzne hodnoty D/J pre $\Delta = 0$: (a) $D/J = -2.6$, (b) $D/J = -2.76$, (c) $D/J = -2.8$, (d) $D/J = -2.9$.

naopak, klesá s rastúcou hodnotou Δ , až úplne zanikne pre $\Delta = 1$. Preto sa táto fáza nerealizuje pre Isingov model, čo svedčí o kvantovomechanickej podstate tejto fázy. Toto správanie jasne ilustruje na obrázku krivka pre $D/J = -4.0$. Krivky pre $D/J = -2.9$ a $D/J = -2.97$ odpovedajú prípadom, keď sa realizujú obe usporiadané fázy, ktoré sú od seba oddelené krivkou fázových prechodov prvého druhu, ktorá môže byť zakončená izolovaným kritickým bodom (pozri krivku pre $D/J = -2.9$).



Obr. 6: Fázové diagramy v rovine (Δ, T) pre rôzne hodnoty D/J .

Spinové usporiadanie fáz pri nulovej teplote zistíme pomocou vlastných vektorov hamiltoniánu (13). Vnútrnú energiu definujeme v súlade s (77) vzťahom

$$\mathcal{U}_k = \langle \hat{\mathcal{H}}_{ij} \rangle_k + J(z-1)m_{Ak}m_{Bk}. \quad (78)$$

Keďže platí $\langle \hat{\mathcal{H}}_{ij} \rangle_k = \langle \psi_k | \hat{\mathcal{H}}_{ij} | \psi_k \rangle = E_k$, možno tento vzťah prepísať do tvaru

$$\mathcal{U}_k = E_k + J(z-1)m_{Ak}m_{Bk}. \quad (79)$$

Pre všetky hodnoty parametra výmennej anizotropie $0 \leq \Delta < 1$ vo fáze \mathcal{O}_1 nadobúda vnútorná energia (79) minimum pre stav $|\psi_1\rangle = |\varphi_1\rangle$ rovnako ako v prípade Isingovho

modelu. V oblasti, kde sa realizuje fáza \mathcal{O}_2 , má najnižšiu vnútornú energiu stav popísaný vlastným vektorom $|\psi_3\rangle$, ktorý je superpozíciou dvoch isingovských stavov: $|\psi_3\rangle = x|\varphi_2\rangle + y|\varphi_3\rangle$. Vlastný vektor $|\varphi_2\rangle$ predstavuje stav, v ktorom priemet spinu atómov podmriežky A je $S_{iA}^z = 1$ a priemet spinu atómov podmriežky B je $S_{jB}^z = -1/2$. Na druhej strane, vlastný vektor $|\varphi_3\rangle$ predstavuje stav, v ktorom je $S_{iA}^z = 0$ a $S_{jB}^z = +1/2$.

Správanie sa tejto fázy pre veľké záporné hodnoty parametra D možno určiť zo správania sa koeficientov x a y :

$$\lim_{D \rightarrow -\infty} x = 0, \quad \lim_{D \rightarrow -\infty} y = 1. \quad (80)$$

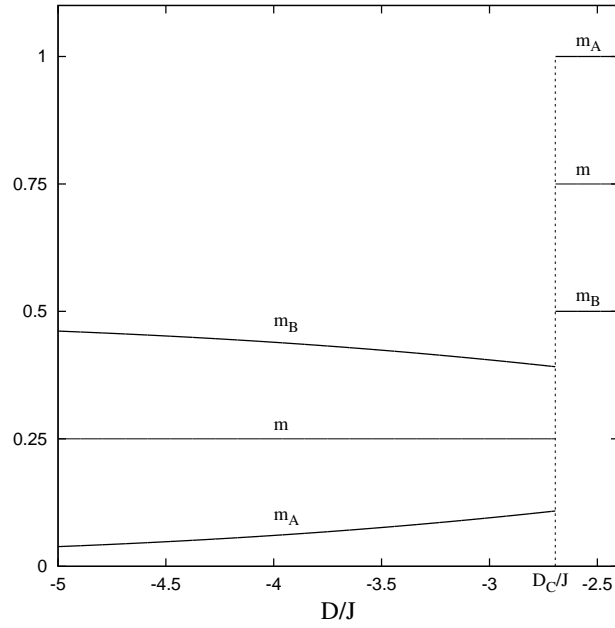
S klesajúcou hodnotou parametra D teda rastie pravdepodobnosť realizácie stavu $|\varphi_3\rangle$ a klesá pravdepodobnosť realizácie stavu $|\varphi_2\rangle$, čoho dôsledkom je nárast hodnoty podmriežkovej magnetizácie m_B a pokles hodnoty podmriežkovej magnetizácie m_A , čo ilustruje obr. 7, ktorý znázorňuje priebeh podmriežkových magnetizácií a celkovej magnetizácie pri nulovej teplote pre prípad $\Delta = 0$. Pokles počtu atómov podmriežky A s nenulovým priemetom spinu do z -ovej osi spôsobí, že sa zoslabuje interakcia medzi spinmi podmriežky B (pripomíname, že v modeli uvažujeme interakcie iba medzi najbližšími susedmi), ale táto fáza existuje pre ľubovoľne veľkú zápornú hodnotu D . Až pre prípad $D = -\infty$ vymiznú všetky atómy podmriežky A s nenulovým priemetom spinu do z -ovej osi, minimálnymi sa zhodne stanú vnútorné energie \mathcal{U}_3 a \mathcal{U}_4 a systém prejde do neusporiadanej fázy \mathcal{D} rovnako ako v prípade Isingovho modelu.

Kritickú hodnotu jednoiónovej anizotropie D_c , pri ktorej nastáva v základnom stave zmena fázy, určíme numericky z podmienky rovnosti vnútorných energií oboch fáz:

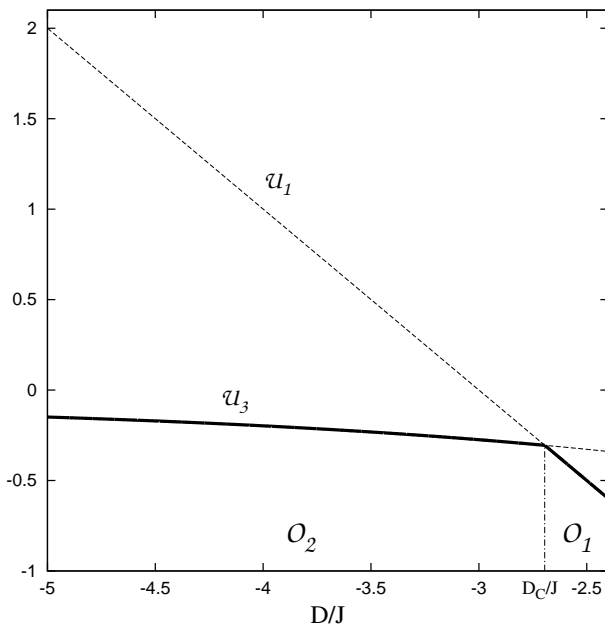
$$E_1 + J(z-1)m_{A1}m_{B1} = E_3 + J(z-1)m_{A3}m_{B3}. \quad (81)$$

Ich priebeh pre prípad $\Delta = 0$ je znázornený na obr. 8. V tomto prípade je $D_c/J = -2.6943$. Hrubou čiarou je znázornená vnútorná energia, ktorá je v bode fázového prechodu spojitá, ale nie hladká, čo dokazuje, že ide o fázový prechod prvého druhu.

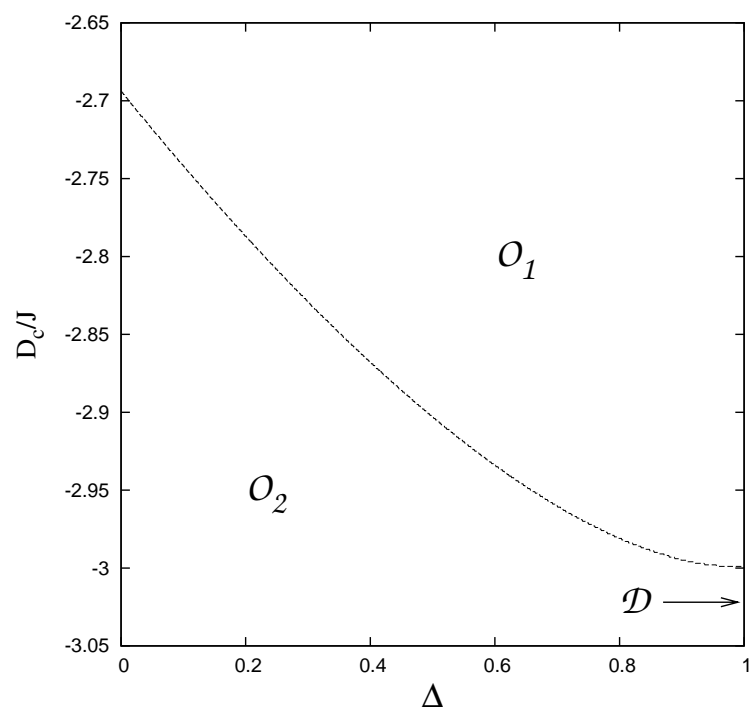
Riešením rovnice (81) je krivka závislosti kritickej hodnoty jednoiónovej anizotropie D_c na parametri výmennej anizotropie Δ , ktorá je zobrazená na obr. 9.



Obr. 7: Závislosť podmriežkových magnetizácií a celkovej magnetizácie v základnom stave pre $\Delta = 0$.



Obr. 8: Závislosť vnútornej energie na D/J v základnom stave pre $\Delta = 0$.



Obr. 9: Závislosť kritickej hodnoty D_c na parametri Δ .

4 Záver

V predloženej diplomovej práci bol študovaný vplyv jednoiónovej a výmennej anizotropie na magnetické vlastnosti kvantového Heisenbergovho modelu so zmiešanými spinmi 1 a $1/2$ použitím párovej Oguchiho aproximácie. Podrobne bol študovaný prípad pre jednoduchú kubickú mriežku s koordinačným číslom $z = 6$. Okrem fázových prechodov druhého druhu boli určené aj fázové prechody prvého druhu, ako aj trikritické a izolované kritické body, pričom zmenou parametrov výmennej a jednoiónovej anizotropie Δ a D boli získané topologicky rozličné fázové diagramy. Bolo zistené, že pre všetky hodnoty parametra Δ existuje na fázovom diagrame trikritický bod, v ktorom prechádza krivka fázových prechodov druhého druhu do krivky fázových prechodov prvého druhu. Na fázových diagramoch pre parameter $\Delta \neq 1$ bola okrem klasickej feromagnetkej usporiadanej fázy \mathcal{O}_1 objavená nová, nízko-teplotná kvantová usporiadaná fáza \mathcal{O}_2 , ktorá neexistuje pre prípad Isingovho modelu, a bolo určené jej spinové usporiadanie pri nulovej teplote. Keďže táto fáza nebola pozorovaná pre prípad anizotropného Heisenbergovho modelu so spinom 1 študovanom tiež v Oguchiho aproximácii [26], jej existencia súvisí s prítomnosťou podmriežky B obsadenej atómami so spinom $S_B = 1/2$. Taktiež bolo ukázané, že táto fáza existuje pre ľubovoľne veľkú zápornú hodnotu parametra jednoiónovej anizotropie D a asymptoticky zaniká až pre prípad $D \rightarrow -\infty$. Keďže táto fáza neexistuje pre prípad $\Delta = 1$ (Isingov model), nie je možné urobiť jednoznačný záver, či jej existencia v prípade kvantového mixovaného systému je dôsledkom použitej aproximácie. O tom môže rozhodnúť iba ďalšie štúdium tohto zaujímavého modelu s použitím iných, sofistikovanejších metód.

5 Dodatky

5.1 Isingova báza ortonormovaných vektorov

Vektory Isingovej bázy $|\varphi_k\rangle$, ktoré sú pre systém so zmiešanými spinmi $S_A = 1$ a $S_B = 1/2$ 6-rozmernými spinormi, majú tvar

$$\begin{aligned}
 |\varphi_1\rangle &= |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
 |\varphi_2\rangle &= |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
 |\varphi_3\rangle &= |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
 |\varphi_4\rangle &= |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
 |\varphi_5\rangle &= |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
 |\varphi_6\rangle &= |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j,
 \end{aligned} \tag{82}$$

príčom ich zapisujeme v tvare

$$|\varphi_k\rangle = |S_A, S_A^z\rangle_i |S_B, S_B^z\rangle_j, \tag{83}$$

kde $S_A = 1$, resp. $S_B = 1/2$, predstavuje celkový spin atómu podmriežky A , resp. B , a S_A^z , resp. S_B^z , predstavuje priemet spinu do smeru osi z . Vlastný vektor (spinor) celého uvažovaného páru (diméru) je potom priamy súčin vlastných vektorov oboch spinových operátorov:

$$|\varphi_1\rangle = |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|\varphi_2\rangle = |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|\varphi_3\rangle = |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|\varphi_4\rangle = |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|\varphi_5\rangle = |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix},$$

$$|\varphi_6\rangle = |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}_i \otimes \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 0 \\ 1 \end{pmatrix}. \quad (84)$$

Ku každému vektoru (ket-vektoru) z tejto bázy existuje jeho hermitovsky združený bra-vektor definovaný ako

$$\langle \varphi_k | = |\varphi_k\rangle^\dagger \equiv (|\varphi_k\rangle^*)^T, \quad (85)$$

kde $(\dots)^\dagger$ označuje hermitovské združenie, $(\dots)^*$ komplexné združenie a $(\dots)^T$ transpozíciu vektora. Konkrétne:

$$\begin{aligned} \langle \varphi_1 | &= \langle 1, +1 |_i \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right|_j = (1, 0, 0)_i \otimes (1, 0)_j = (1, 0, 0, 0, 0, 0), \\ \langle \varphi_2 | &= \langle 1, +1 |_i \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right|_j = (1, 0, 0)_i \otimes (0, 1)_j = (0, 1, 0, 0, 0, 0), \\ \langle \varphi_3 | &= \langle 1, 0 |_i \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right|_j = (0, 1, 0)_i \otimes (1, 0)_j = (0, 0, 1, 0, 0, 0), \\ \langle \varphi_4 | &= \langle 1, 0 |_i \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right|_j = (0, 1, 0)_i \otimes (0, 1)_j = (0, 0, 0, 1, 0, 0), \\ \langle \varphi_5 | &= \langle 1, -1 |_i \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right|_j = (0, 0, 1)_i \otimes (1, 0)_j = (0, 0, 0, 0, 1, 0), \\ \langle \varphi_6 | &= \langle 1, -1 |_i \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right|_j = (0, 0, 1)_i \otimes (0, 1)_j = (0, 0, 0, 0, 0, 1). \end{aligned} \quad (86)$$

Ľahko sa presvedčíme, že pre bra-vektory a ket-vektory platí podmienka ortonormovanosti:

$$\langle \varphi_m | \varphi_n \rangle = \delta_{mn}. \quad (87)$$

5.2 Vyjadrenie Hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ v ľubovoľnej báze ortonormovaných funkcií

Vyjadrenie hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ pomocou priameho súčinu spinových operátorov, ako sme urobili v časti 2.1, je najjednoduchší, avšak nie jediný spôsob, ako vyjadriť operátor v

maticovej reprezentácii. V niektorých prípadoch je potrebné vyjadriť si hamiltonián vo vopred zadanej báze ortonormovaných funkcií. Ilustrujme tento postup na báze funkcií

$$\begin{aligned}
|\xi_1\rangle &= |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
|\xi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
|\xi_3\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j - \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
|\xi_4\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j + \frac{1}{\sqrt{3}} |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
|\xi_5\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
|\xi_6\rangle &= |1, -1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j,
\end{aligned} \tag{88}$$

ktoré predstavujú vlastné stavy izotropného kvantového heisenbergovského spinového diméru so spinmi 1 a 1/2, pričom koeficienty pri jednotlivých isingovských stavoch sa nazývajú Clebsch-Gordanove koeficienty [23]. Poznamenávame, že táto báza predstavuje limitný prípad bázy vlastných vektorov hamiltoniánu $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ (38) pre prípad $h_i = 0$ a $h_j = 0$.

Zaveďme tzv. posuvné operátory

$$\begin{aligned}
\hat{S}_{iA}^+ &= \hat{S}_{iA}^x + i\hat{S}_{iA}^y, \\
\hat{S}_{iA}^- &= \hat{S}_{iA}^x - i\hat{S}_{iA}^y, \\
\hat{S}_{jB}^+ &= \hat{S}_{jB}^x + i\hat{S}_{jB}^y, \\
\hat{S}_{jB}^- &= \hat{S}_{jB}^x - i\hat{S}_{jB}^y,
\end{aligned} \tag{89}$$

kde i je imaginárna jednotka. V maticovej reprezentácii majú tieto operátory tvar

$$\hat{S}_{iA}^+ = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_i, \quad \hat{S}_{iA}^- = \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 1 & 0 \end{pmatrix}_i, \tag{90}$$

$$\hat{S}_{jB}^+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}_j, \quad \hat{S}_{jB}^- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_j, \tag{91}$$

pričom index za maticou označuje uzol mriežky, s ktorým je daný operátor spojený. Ich účinok je nasledovný:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_{iA}^+ |1, +1\rangle_i &= |0\rangle_i, & \hat{S}_{iA}^- |1, +1\rangle_i &= \sqrt{2} |1, 0\rangle_i, \\
\hat{S}_{iA}^+ |1, 0\rangle_i &= \sqrt{2} |1, +1\rangle_i, & \hat{S}_{iA}^- |1, 0\rangle_i &= \sqrt{2} |1, -1\rangle_i, \\
\hat{S}_{iA}^+ |1, -1\rangle_i &= \sqrt{2} |1, 0\rangle_i, & \hat{S}_{iA}^- |1, -1\rangle_i &= |0\rangle_i, \\
\hat{S}_{jB}^+ \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j &= |0\rangle_j, & \hat{S}_{jB}^- \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j &= \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
\hat{S}_{jB}^+ \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j &= \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, & \hat{S}_{jB}^- \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j &= |0\rangle_j,
\end{aligned} \tag{92}$$

pričom

$$|0\rangle_i = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i \quad \text{a} \quad |0\rangle_j = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_j \tag{93}$$

predstavujú stavy s nulovou pravdepodobnosťou. Skrátene to môžeme zapísať vzťahmi

$$\begin{aligned}
\hat{S}_{iA}^\pm |S_{iA}, S_{iA}^z\rangle_i &= \sqrt{S_{iA}(S_{iA} \pm 1) - S_{iA}^z(S_{iA}^z \pm 1)} |S_{iA}, S_{iA}^z \pm 1\rangle_i, \\
\hat{S}_{jB}^\pm |S_{jB}, S_{jB}^z\rangle_j &= \sqrt{S_{jB}(S_{jB} \pm 1) - S_{jB}^z(S_{jB}^z \pm 1)} |S_{jB}, S_{jB}^z \pm 1\rangle_j.
\end{aligned} \tag{94}$$

Hamiltonián (2) možno pomocou operátorov (89) zapísať v tvare

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{ij} &= -\frac{J}{2} [(1 - \Delta)(\hat{S}_{iA}^+ \hat{S}_{jB}^- + \hat{S}_{iA}^- \hat{S}_{jB}^+) + 2\hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z] - D(\hat{S}_{iA}^z)^2 \\
&\quad - (h_i \hat{S}_{iA}^z + h_j \hat{S}_{jB}^z).
\end{aligned} \tag{95}$$

V maticovej reprezentácii sú jeho elementy definované ako

$$(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{mn} = \langle \xi_m | \hat{\mathcal{H}}_{ij} | \xi_n \rangle \quad (m = 1, 2, \dots, 6; n = 1, 2, \dots, 6). \tag{96}$$

Aby sme ich vyjadrili, potrebujeme najskôr zistiť, ako pôsobia jednotlivé operátory $\hat{S}_{iA}^+ \hat{S}_{jB}^-$, $\hat{S}_{iA}^- \hat{S}_{jB}^+$, $\hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z$, $(\hat{S}_{iA}^z)^2$, \hat{S}_{iA}^z a \hat{S}_{jB}^z na jednotlivé vektory bázy. Ukážeme si to na príklade vektora $|\xi_2\rangle$:

$$\hat{S}_{iA}^+ \hat{S}_{jB}^- |\xi_2\rangle = \hat{S}_{iA}^+ \hat{S}_{jB}^- \left(\frac{1}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j + \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j \right)$$

$$\begin{aligned}
&= \sqrt{2} \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 0 & 0 & 1 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}_j \left[\frac{1}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j + \sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \\ 0 \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}_j \right] \\
&= \left[\sqrt{\frac{2}{3}} \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \end{pmatrix}_j + \frac{2}{\sqrt{3}} \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}_i \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}_j \right] = \frac{2}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j.
\end{aligned} \tag{97}$$

Podobným spôsobom vypočítame aj pôsobenie ostatných operátorov na $|\xi_2\rangle$:

$$\begin{aligned}
\hat{S}_{iA}^- \hat{S}_{jB}^+ |\xi_2\rangle &= \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
\hat{S}_{iA}^z \hat{S}_{jB}^z |\xi_2\rangle &= -\frac{1}{2\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
(\hat{S}_{iA}^z)^2 |\xi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
\hat{S}_{iA}^z |\xi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j, \\
\hat{S}_{jB}^z |\xi_2\rangle &= -\frac{1}{2} \left(\frac{1}{\sqrt{3}} |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j - \sqrt{\frac{2}{3}} |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j \right).
\end{aligned} \tag{98}$$

Výsledkom pôsobenia operátora $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ na vektor $|\xi_2\rangle$ je teda vektor

$$\begin{aligned}
\hat{\mathcal{H}}_{ij} |\xi_2\rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{J}{2} [(1 - \Delta) + 1] - D - h_i + \frac{h_j}{2} \right) |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j \\
&\quad + \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\frac{J}{2} (1 - \Delta) - \frac{h_j}{2} \right) |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j.
\end{aligned} \tag{99}$$

Podobne vypočítame aj pôsobenie $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ na všetky ostatné vektory bázy (88). Všetkých 36 elementov matice $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ vypočítame podľa vzťahu (96), pričom využijeme, že vlastné vektory bázy (88) sú ortonormované, t.j. platí vzťah $\langle \xi_m | \xi_n \rangle = \delta_{mn}$. Napríklad

$$\begin{aligned}
\langle \xi_2 | \hat{\mathcal{H}}_{ij} | \xi_2 \rangle &= \frac{1}{\sqrt{3}} \left(-\frac{J}{2} [(1 - \Delta) + 1] - D - h_i + \frac{h_j}{2} \right) \\
&\times \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \langle 1, +1 | \left\langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right| + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle 1, 0 | \left\langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right| \right) |1, +1\rangle_i \left| \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} \right\rangle_j \\
&+ \sqrt{\frac{2}{3}} \left(-\frac{J}{2} (1 - \Delta) - \frac{h_j}{2} \right)
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& \times \left(\frac{1}{\sqrt{3}} \langle 1, +1 |_i \langle \frac{1}{2}, -\frac{1}{2} |_j + \sqrt{\frac{2}{3}} \langle 1, 0 |_i \langle \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} |_j \right) |1, 0\rangle_i \left| \frac{1}{2}, +\frac{1}{2} \right\rangle_j \\
& = -\frac{J}{6} [4(1 - \Delta) - 1] - \frac{1}{3} \left(D + h_i + \frac{h_j}{2} \right). \tag{100}
\end{aligned}$$

Podobne vypočítame všetky elementy a zistíme, že nenulové sú iba elementy $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{11}$, $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{22}$, $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{33}$, $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{44}$, $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{55}$, $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{66}$, $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{23} = (\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{32}$ a $(\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{45} = (\hat{\mathcal{H}}_{ij})_{54}$. Matica $\hat{\mathcal{H}}_{ij}$ má teda tvar

$$\hat{\mathcal{H}}_{ij} = \begin{pmatrix} \tilde{a} & 0 & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{b} & \tilde{d} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \tilde{d} & \tilde{c} & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{e} & \tilde{g} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \tilde{g} & \tilde{f} & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 0 & \tilde{h} \end{pmatrix}, \tag{101}$$

kde

$$\begin{aligned}
\tilde{a} &= -\frac{J}{2} - \left(D + h_i + \frac{h_j}{2} \right), \\
\tilde{b} &= -\frac{J}{6} [4(1 - \Delta) - 1] - \frac{1}{3} \left(D + h_i + \frac{h_j}{2} \right), \\
\tilde{c} &= \frac{J}{3} [2(1 - \Delta) + 1] - \frac{2}{3} \left(D + h_i - \frac{h_j}{4} \right), \\
\tilde{d} &= -\frac{\sqrt{2}}{6} J [(1 - \Delta) - 1] - \frac{\sqrt{2}}{3} (D + h_i - h_j), \\
\tilde{e} &= -\frac{J}{6} [4(1 - \Delta) - 1] - \frac{1}{3} \left(D - h_i - \frac{h_j}{2} \right), \\
\tilde{f} &= \frac{J}{3} [2(1 - \Delta) + 1] - \frac{2}{3} \left(D - h_i + \frac{h_j}{4} \right), \\
\tilde{g} &= \frac{\sqrt{2}}{6} J [(1 - \Delta) - 1] + \frac{\sqrt{2}}{3} (D - h_i + h_j), \\
\tilde{h} &= -\frac{J}{2} - \left(D - h_i - \frac{h_j}{2} \right). \tag{102}
\end{aligned}$$

Táto matica má rovnaké vlastné hodnoty a vlastné vektory ako matica (13), teda obe reprezentácie hamiltoniánu (2) dávajú rovnaké fyzikálne výsledky.

Podobným spôsobom môžeme vyjadriť hamiltonián (2) aj v Isingovej báze (82) a zistíme, že jeho tvar je totožný s tvarom (13), ktorý sme získali priamym súčinom spinových operátorov: matica, ktorú získame priamym súčinom spinových operátorov, predstavuje teda hamiltonián vyjadrený v Isingovej báze.

5.3 Koefficienty rozvojov podmriežkových magnetizácií m_A a m_B

Zaveďme označenia:

$$\begin{aligned}
A &= 2 \exp \left[\beta \left(\frac{J}{2} + D \right) \right], \\
B &= 2 \exp \left[-\frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - D \right) \right], \\
C &= \frac{\beta}{2} \left(\frac{J}{2} - D \right), \\
G &= \frac{1}{2} \beta^2 J^2 (1 - \Delta)^2, \\
R &= \sqrt{C^2 + G}, \\
\mathcal{Z}_0 &= A + 2B \cosh(R),
\end{aligned} \tag{103}$$

kde posledný z výrazov predstavuje partičnú funkciu (40) pre prípad $m_A = 0$ a $m_B = 0$.

Koefficienty a_k , b_k ($k = 1, 2, \dots, 6$) v rozvojoch podmriežkových magnetizácií (55) a (56) sú dané vzťahmi:

$$\begin{aligned}
a_1 &= \frac{\beta(z-1)}{2R^3 \mathcal{Z}_0} \left(AR^3 - BC^2 R \cosh(R) + B[C^3 + (-1 + C)G] \sinh(R) \right), \\
a_2 &= \frac{\beta(z-1)}{2R^3 \mathcal{Z}_0} [2AR^3 + BR(2C^2 + G) \cosh(R) + B(G - 2CR^2) \sinh(R)], \\
a_3 &= \frac{\beta^3(z-1)^3}{16R^8 \mathcal{Z}_0^2} \left[-2R^2 [4A^2 R^6 + B^2 (2C^6 + C^2 [-6 + C(-9 + 5C)]) G \right. \\
&\quad \left. + 3[1 + (-3 + C)C] G^2 \right] + B \left[AR^2 (4C^6 + C^2 [12 + C(9 + 11C)]) G \right. \\
&\quad \left. + 3[-1 + 3C(1 + C)] G^2 + 2G^3 \right) \cosh(R) + 2BC^2 R^2 [4C^4 + 7C^2 G \\
&\quad \left. + 3G(2 + G)] \cosh(2R) - R \left(A [-4C^7 - 3C^2 (-4 + C[-3 + C(-1 + 3C)])] G \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 3(1 - 3C + 2C^3) G^2 - (3 + C) G^3 \right) + 2B [8C^7 + 3C^2 (4 + 3C + 6C^3) G \right. \\
&\quad \left. \left. + 3(-1 + 3C + 4C^3) G^2 + 2CG^3 \right] \cosh(R) \right) \sinh(R) \Bigg],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
a_4 &= \frac{\beta^3(z-1)^3}{16R^7\mathcal{Z}_0^2} \left[-2R \left(2A^2R^6 - B^2G \left[3G + C \left(-6G + C[-6 + (-6 + C)C + G] \right) \right] \right) \right. \\
&\quad + B \left[AR \left(8C^6 + 6(-1 + C)C^2(2 + 3C)G + [3 + C(-6 + 13C)]G^2 \right. \right. \\
&\quad + \left. \left. 3G^3 \right) \cosh(R) - 2BC^2R(2C^4 + 3(2 + C^2)G + G^2) \cosh(2R) \right. \\
&\quad + A \left[-8C^7 - 2C^2 \left(-6 + C[-3 + C(-5 + 11C)] \right) \right] G - (1 + 2C)[3 \\
&\quad + \left. 2C(-6 + 5C)]G^2 - 2(-2 + 3C)G^3 \right] \sinh(R) + B[4C^7 + 2C^2(6 + 3C \\
&\quad + \left. 4C^3)G + (-3 + 6C + 4C^3)G^2] \sinh(2R) \left. \right] \right], \\
a_5 &= \frac{\beta^3(z-1)^3}{48R^7\mathcal{Z}_0^2} \left[2R \left[-A^2R^6 + B^2 \left(C^6 + C^2[6 + C(3 + C)]G + 3(-1 + C)G^2 \right) \right] \right. \\
&\quad + B \left(AR \left(-2C^6 - C^2[-12 + (-3 + C)C]G + 3(-1 + C + C^2)G^2 \right. \right. \\
&\quad + \left. \left. 2G^3 \right) \cosh(R) + 2BC^2R[C^4 + (6 + C^2)G] \cosh(2R) - A[2C^7 \right. \\
&\quad + \left. C^2(12 + C[3 + C(9 + 7C)])G + (-3 + C[3 + 4C(3 + 2C)])G^2 \right. \\
&\quad + \left. \left. 3(1 + C)G^3 \right] \sinh(R) - B[2C^7 + C^2(12 + 3C + 4C^3)G \right. \\
&\quad + \left. \left. (-3 + 3C + 2C^3)G^2] \sinh(2R) \right] \right], \\
a_6 &= \frac{\beta^3(z-1)^3}{48R^8\mathcal{Z}_0^2} \left[-2R^2 \left[8A^2R^6 + B^2 \left(-4C^6 - 2C^2(-3 - 6C + 4C^2)G \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. - 3[1 + (-4 + C)C]G^2 + G^3 \right) \right] + B \left[-AR^2 \left(24C^6 + 4C^2[3 + C(3 + 14C)]G \right. \right. \\
&\quad + \left. \left. 3[-1 + C(4 + 13C)]G^2 + 7G^3 \right) \cosh(R) - 2BR^2[8C^6 + 16C^4G + G^3 \right. \\
&\quad + \left. \left. 3C^2G(2 + 3G)] \cosh(2R) + R \left(A[40C^7 + 4C^2(3 + C[3 + C(-3 + 31C)]) \right] G \right. \right. \\
&\quad + \left. \left. (-3 + 2C[6 + C(-15 + 64C)])G^2 + 2(-9 + 22C)G^3 \right] + 2B[16C^7 \right. \\
&\quad + \left. \left. 4C^2(3 + 3C + 10C^3)G + (-3 + 12C + 32C^3)G^2 + 8CG^3] \cosh(R) \right) \sinh(R) \right] \left. \right], \\
b_1 &= \frac{\beta(z-1)}{4R^3\mathcal{Z}_0} [AR^3 + 2BC^2R \cosh(R) + 2BG \sinh(R)], \\
b_2 &= a_1, \\
b_3 &= \frac{\beta^3(z-1)^3}{16R^8\mathcal{Z}_0^2} \left[-2R^2 \left(2A^2R^6 - B^2G \left[3G + C \left(-6G + C[-6 \right. \right. \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (-6 + C)C + G] \right) \right) \right] + B \left(AR^2 \left(8C^6 + 6(-1 + C)C^2(2 + 3C)G \right. \right. \\
&\quad \left. \left. + (-6 + C)C + G] \right) \right) \right],
\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}
& + [3 + C(-6 + 13C)]G^2 + 3G^3) \cosh(R) - 2BC^2R^2[2C^4 + 3C^2G \\
& + G(6 + G)] \cosh(2R) + R\left(A[-8C^7 - 2C^2(-6 + C[-3 + C(-5 + 11C)])]G \right. \\
& - (1 + 2C)[3 + 2C(-6 + 5C)]G^2 - 2(-2 + 3C)G^3] + 2B[4C^7 \\
& \left. + 2C^2(6 + 3C + 4C^3)G + (-3 + 6C + 4C^3)G^2] \cosh(R)\right) \sinh(R) \Bigg], \\
b_4 = & \frac{\beta^3(z-1)^3}{16R^7\mathcal{Z}_0^2} \left[2R[-A^2R^6 + B^2(C^6 + C^2[6 + C(C+3)]G + 3(C-1)G^2)] \right. \\
& + B\left(AR(-2C^6 - C^2[-12 + (C-3)C]G + 3(C^2 + C - 1)G^2 + 2G^3) \cosh(R) \right. \\
& + 2BC^2R[C^4 + (C^2 + 6)G] \cosh(2R) \\
& - A[2C^7 + C^2(12 + C[3 + C(9 + 7C)])]G + (-3 + C[3 + 4C(3 + 2C)])G^2 \\
& + 3(1 + C)G^3] \sinh(R) - B[2C^7 + C^2(12 + 3C + 4C^3)G \\
& \left. + (-3 + 3C + 2C^3)G^2] \sinh(2R) \Bigg], \\
b_5 = & -\frac{\beta^3(z-1)^3}{48R^7\mathcal{Z}_0^2} \left[R(A^2R^6 + 2B^2[C^6 + C^2(6 + C^2)G - 3G^2]) \right. \\
& + B\left(AR[4C^6 + 8C^4G - G^2(3 + G) + 3C^2G(4 + G)] \cosh(R) \right. \\
& + 2BC^2R[C^4 + (6 + C^2)G] \cosh(2R) \\
& \left. + 3G[A(G + 2[C^2(-2 + G) + G^2]) \sinh(R) + B(-4C^2 + G) \sinh(2R)] \Bigg], \\
b_6 = & \frac{\beta^3(z-1)^3}{48R^8\mathcal{Z}_0^2} \left[-2R^2[4A^2R^6 + B^2(2C^6 + C^2[-6 + C(-9 + 5C)])G \right. \\
& + 3[1 + (-3 + C)C]G^2] + B\left[AR^2(4C^6 + C^2[12 + C(9 + 11C)]G \right. \\
& + 3[-1 + 3C(1 + C)]G^2 + 2G^3) \cosh(R) + 2BC^2R^2[4C^4 + 7C^2G \\
& + 3G(2 + G)] \cosh(2R) - R\left(A[-4C^7 - 3C^2(-4 + C[-3 + C(-1 + 3C)])]G \right. \\
& - 3(1 - 3C + 2C^3)G^2 - (3 + C)G^3] + 2B[8C^7 + 3C^2(4 + 3C + 6C^3)G \\
& \left. + 3(-1 + 3C + 4C^3)G^2 + 2CG^3] \cosh(R)\right) \sinh(R) \Bigg]. \tag{104}
\end{aligned}$$

Literatúra

- [1] G. M. Buendía, E. Machado, Phys. Rev. B 61 (2000) 14 686.
- [2] A. P. Vieira, J.X. de Carvalho, S.R. Salinas, Phys. Rev. B 63 (2001) 184415.
- [3] T. Kaneyoshi, J. Phys.: Condens. Matter 14 (2002) 2001.
- [4] A. Bobák, O.F. Abubrig, D. Horváth, J. Magn. Magn. Mater. 246 (2002) 177.
- [5] A. Bobák, F.O. Abubrig, T. Balcerzak, Phys. Rev. B 68 (2003) 224405.
- [6] J. Oitmaa, Phys. Rev. B 72 (2005) 224404.
- [7] E. Albayrak, A. Alçi, Physica A 345 (2005) 48.
- [8] G. Wei, Y. Gu, J. Liu, Phys. Rev. B 74 (2006) 024422.
- [9] S. Ohkoshi, T. Iyoda, A. Fujishima, K. Hashimoto, Phys. Rev. B 56 (1997) 11642.
- [10] S. Ohkoshi, Y. Abe, A. Fujishima, K. Hashimoto, Phys. Rev. Lett. 82 (1999) 1285.
- [11] M. Mansuripur, J. Appl. Phys. 61 (1987) 1580.
- [12] M. Multigner, S. Lakamp, G. Pourroy, A. Hernando, R. Valenzuela, Appl. Phys. Lett. 69 (1996) 2761.
- [13] O. Kahn, Molecular Magnetism, VCH Publishers, New York, 1993.
- [14] S. Dai, Q. Jiang, Z.Y. Li, Phys. Rev. B 42 (1990) 2597.
- [15] T. Kaneyoshi, Physica A 272 (1999) 545.
- [16] N. Benayad, R. Zerhouni, A. Klümper. J. Zittartz, Physica A 262 (1999) 483.
- [17] W. Jiang, G. Wei, Z. Zhang, Phys. Rev. B 68 (2003) 134432.
- [18] T. Iwashita, N. Uryu, Phys. Lett. 116A (1984) 432.

- [19] W. Zheng, J. Oitmaa, Phys. Rev. B 67 (2003) 224421.
- [20] J. Li, A. Du, G. Wei, Phys. Stat. Sol. (b) 238 (2003) 191.
- [21] J. Li, G. Wei, A. Du, J. Magn. Magn. Mater. 269 (2004) 410.
- [22] J. S. Smart, Effective field theories of magnetism, W.B. Saunders Company, London, 1966.
- [23] J. Formánek, Úvod do kvantové teorie, Academia, Praha, 2004.
- [24] R. Shankar, Principles of quantum mechanics, Plenum, New York, 1994.
- [25] L. D. Landau, E. M. Lifšic, Statističeskaja fizika, Nauka, Moskva, 1973.
- [26] J. Strečka, J. Dely, L. Čanová, Chin. J. Phys. (v tlači).