

О.Р. БАРАН

Інститут фізики конденсованих систем НАН України  
(Вул. Свенціцького, 1, Львів 79011; e-mail: ost@ph.ictp.lviv.ua)

**МАГНЕТОКАЛОРИЧНИЙ ЕФЕКТ  
У СПІН-1/2 ОДНОВИМІРНИЙ ХХ МОДЕЛІ  
З ДВОМА РЕГУЛЯРНОЗМІННИМИ  $g$ -ФАКТОРАМИ**

УДК 537.63, 537.638.5,  
537.9

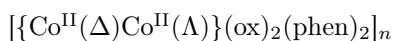
*Досліджено вплив неоднорідності  $g$ -факторів, коли вони є регулярнозмінними з періодом два, на магнетокалоричний ефект у спін-1/2 ХХ ланцюжку в поперечному магнітному полі. За допомогою перетворення Йордана–Віґнера задача зводиться до гамільтоніана не взаємодіючих безспінових ферміонів і розв’язується точно. Проаналізовано, як змінюються ізентропи та польові залежності параметра Грюнайзена зі зміною  $g_2/g_1$ . Основна увага приділяється низькотемпературній області. Показано відмінності магнетокалоричного ефекту у випадках, коли  $g$ -фактори мають однакові та різні знаки, а також коли один із  $g$ -факторів дорівнює нулю.*

*Ключові слова:* одновимірні квантові спінові моделі,  $g$ -фактор, ферміонізація Йордана–Віґнера, магнетокалоричний ефект, квантовий фазовий перехід.

**1. Вступ**

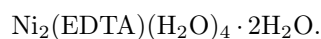
**1.1. Одновимірні системи з регулярнозмінними  $g$ -факторами**

Серед магнітних матеріалів існує цілий ряд сполук, які можуть бути адекватно описаними на основі спінових ланцюжків із регулярнозмінними  $g$ -факторами. Зокрема, магнітні властивості молекулярного магнетика



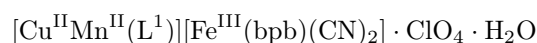
можна пояснити, використовуючи ланцюжок Ізінґа з двома різними  $g$ -факторами на сусідніх вузлах ( $g_1 = 2,5$ ,  $g_2 = 2,1$ ) та двома різними обмінними взаємодіями [1]. У роботі [2] спін-1  $g_1 - g_2$  ланцюжками Гайзенберґа та Ізінґа з антиферромагнітними взаємодіями моделюється двоїдгратко-

ва одновимірна (1D) система



Отримується добре узгодження між теорією й експериментом при  $g_2/g_1 = 1,1$ . Одновимірний комплексний оксид  $\text{Sr}_3\text{CuIrO}_6$ , який містить як  $3d$  ( $\text{Cu}^{2+}$ ), так і  $5d$  ( $\text{Ir}^{4+}$ ) магнітні йони, описується спін-1/2 феромагнітною моделлю Гайзенберґа з магнітною анізотропією типу легка вісь ( $\gamma = J^z/J^x = J^z/J^y \approx 2,55$ ) та регулярнозмінним  $g$ -фактором з періодом два, причому йонам міді відповідає спін із  $g \approx 2$ , а йонам іридію – ізспін із  $g \approx -3$  [3,4]. Зауважимо, що у перших двох згаданих вище сполуках  $g$ -фактори на сусідніх вузлах мають однаковий знак, а у третій – різні.

Доцільно також згадати про сполуки, які описуються дещо більш складними одновимірними спіновими моделями. Так, гетеротриметалічний координаційний полімер



наближено можна розглядати (дивись працю [5]) як спін-1/2 Ізінґовий ланцюжок, вузли якого по-

Цитування: Баран О.Р. Магнетокалоричний ефект у спін-1/2 одновимірній ХХ моделі з двома регулярнозмінними  $g$ -факторами. *Укр. фіз. журн.* **68**, № 7, 490 (2023).  
Citation: Baran O.R. Magnetocaloric effect in the one-dimensional spin-1/2 ХХ model with two periodically varying  $g$ -factors. *Ukr. J. Phys.* **68**, No. 7, 488 (2023). <https://doi.org/10.15407/ujpe68.7.488>.

чергово займають іони заліза  $\text{Fe}^{3+}$  та марганцю  $\text{Mn}^{2+}$  з додатковими йонами міді  $\text{Cu}^{2+}$ , які “під’єднані збоку” до йонів марганцю, обмінна взаємодія між якими є анізотропною Гайзенберговою ( $XXZ$ ). Значення  $g$ -факторів для  $\text{Fe}^{3+}$ ,  $\text{Cu}^{2+}$  та  $\text{Mn}^{2+}$  покладались рівними 2,4, 2,2 та 10 відповідно. Те, що для йона марганцю  $g_{\text{Mn}} = 10$ , пов’язано із тим, що у розглянутій у роботі моделі всім іонам ставились у відповідність спіни  $s = 1/2$  (для спрощення задачі), тоді як для  $\text{Mn}^{2+}$  мало би бути  $s = 5/2$ .

Іншим прикладом є нескінченний полімерний ланцюжок  $[\text{DyCuMoCu}]_{\infty}$ , у якому між диспрозієм та молібденом є, так би мовити, взаємодія наступних після найближчих сусідів [6]. Елементарна комірка у цій сполуці містить чотири магнітні йони з трьома різними значеннями  $g$ -фактора. При цьому йони диспрозію  $\text{Dy}^{3+}$  описуються Ізінговими спінами, а йони міді  $\text{Cu}^{2+}$  та молібдену  $\text{Mo}^{5+}$  – Гайзенберговими. Оскільки Ізінгові спіни є декорованими тримером Гайзенберга  $[\text{CuMoCu}]$ , то така задача може бути розв’язаною точно.

Для пояснення певних експериментальних результатів для координаційної сполуки бензоата міді в роботах [7, 8] розглянули спінову модель із знакозмінною (для сусідніх вузлів) взаємодією Дзялошинського-Морія та  $g$ -тензором, певні елементи якого є також знакозмінними. Ці знакозмінності приводять до ефективної моделі, а саме моделі Гайзенберга зі знакозмінним магнітним полем вздовж осі  $x$  та однорідним полем вздовж осі  $z$  (що еквівалентно регулярнозмінному  $g$ -фактору). Подібну модель також застосовували у праці [9] для моделювання спін-1/2 антиферомагнітного ланцюжка  $\text{CuCl}_2 \cdot 2[(\text{CD}_3)_2\text{SO}]$ .

### 1.2. Перетворення Йордана–Вігнера

Для дослідження різноманітних одно-, дво- та тривимірних спінових систем широко застосовуються підходи та наближення, в яких використовуються різні варіанти ферміонізації Йордана–Вігнера (див. огляд [10]). Перевагою таких методів є те, що сильноскорельовані спінові стани можна компактно описати мовою ферміонних збуджень.

Уперше одновимірне перетворення Йордана–Вігнера було реалізовано більше ніж півстоліття тому в роботі [11] для спін-1/2  $XY$  ланцюжка. В

результаті ферміонізації задача звелася до гамільтоніана невзаємодіючих безспінових ферміонів і була розв’язаною точно.

Пізніше на основі такої одновимірної ферміонізації були отримані як точні, так і наближені результати для термодинамічних та динамічних характеристик цілого ряду одновимірних моделей.

Наприклад, у роботах [12, 13] розв’язано точно задачу одновимірного спін-1/2  $XX$  ланцюжка у поперечному полі з двома різними  $g$ -факторами ( $g_1$  та  $g_2$ ) на сусідніх вузлах. У [12], окрім  $g$ -факторів, покладались регулярнозмінними з тим же періодом (два) і обмінні взаємодії. Автори обмежились лише розглядом термодинамічних характеристик і випадком, коли  $g_1$  та  $g_2$  мають однаковий знак. У праці ж [13] дослідження проводилось як для  $g_1 g_2 > 0$ , так і для  $g_1 g_2 \leq 0$ . Основна увага зосереджувалась на аналізі динамічних характеристик, а саме поперечних та поздовжніх інтенсивностей поглинання (які спостерігаються у експериментах з електронного спінового резонансу (ЕСР)) та динамічних структурних факторів (які можуть бути досліджені в експериментах з магнітного розсіяння нейтронів). Вирази для усіх досліджуваних величин були отримані аналітично, за винятком поздовжнього структурного фактора, для обчислення якого використовувався метод, розроблений у [14, 15].

У роботі [16] розглядали одновимірну спін-1/2 анізотропну  $XY$  модель у поперечному полі з регулярнозмінними  $g$ -факторами, і обмінними взаємодіями з тим самим (для обох мікроскопічних параметрів) довільним періодом.

Були отримані точні результати для ряду термодинамічних характеристик, а також для  $zz$  парної динамічної кореляційної функції та  $zz$  динамічної сприйнятливості.

Із цілого ряду робіт, в яких отримуються строгі результати завдяки реалізації одновимірного перетворення Йордана–Вігнера можна, наприклад, згадати про ті, де в гамільтоніані окрім двоспінових взаємодій наявні й триспінові (див., наприклад, [17–24]).

Зокрема праці [23, 24] були присвячені дослідженню одновимірних магнетоелектриків, у яких пов’язаність локалізованих спінів (тобто магнітних моментів) із електричною поляризованістю зв’язку, що з’єднує ці спіни, описується механізмом Кацури–Нагаоси–Балацького [25].

Менчишином із співавторами було показано [23], що врахування додатково триспінових взаємодій може привести до нетривіального магнетоелектричного ефекту (індукування електричної поляризації магнітним полем при нульовому електричному полі і навпаки), який не реалізується у 1D магнетоелектриках лише з парними обмінами [26–28].

У роботі ж [24] триспінові взаємодії ( $XZY - YZX$  та  $XZX + YZY$ ) виникли, так би мовити, природно в результаті розгляду стаціонарного потоку енергії на основі методу множника Лагранжа (див. [17, 29]) у одновимірній спин-1/2 ізотропній  $XU$  моделі магнетоелектрика лише з двоспіновими взаємодіями.

Також доцільно виділити окремо працю [20]. У ній був отриманий строгий результат для  $XX$  моделі не тільки з триспіновими взаємодіями ( $XZY - YZX$ ), а й з однорідною парною далекосяжною взаємодією  $z$  компонент спіна.

Далеко не усі 1D спінові моделі в рамках перетворення Йордана–Вігнера передбачають точний розв’язок. Наприклад, для дослідження анізотропного  $XU$  лінійного ланцюжка з однорідною далекосяжною Ізінговою взаємодією у магнітному полі, напрямленому вздовж осі  $z$  [30], аналогічно як і для одновимірних анізотропних  $XXZ$  та  $XUZ$  моделей у поперечному полі [31, 32], було реалізоване наближення типу середнього поля для прямої взаємодії між ферміонами.

Певне наближення після ферміонізації потрібно також проводити для спин-1/2 ромбовидного  $XX$  ланцюжка. Зокрема у роботі [33] знехтували фазовими факторами, а у [34] застосовано наближення Гартрі–Фока.

Якщо ж говорити про системи з вимірністю, більшою від 1D, то, наприклад, у роботі [35] було реалізовано одне із узагальнень одновимірного перетворення Йордана–Вігнера на випадок спин-1/2 моделі Гайзенберга на квадратній ґратці (див. також [36, 37] та огляд [10]).

Перетворений гамільтоніан відповідає взаємодіючим безспіновим ферміонам, які перестрибують між сусідніми вузлами в згенерованому у цьому підході фіктивному калібрувальному магнітному полі. Використовуючи наближення типу середнього поля, як для прямої взаємодії між ферміонами, так і для фазових множників, які відповідають калібрувальному полю, задача зводилась до вільного газу Фермі та вивчались властивості основно-

го стану [35]. Пізніше цей метод адаптовували для дослідження інших систем, зокрема для анізотропної та ізотропної  $XU$  моделі на прямокутній ґратці [38–40] та для фрустрованої моделі Гайзенберга з взаємодіями найближчих та наступних після найближчих сусідів [41, 42]. Слід зауважити, що у згаданих роботах потік вектора напруженості фіктивного магнітного поля розглядався однаковим для усіх прямокутних елементарних плакеток, в той час як, наприклад, у праці [43] (див. також [44]) він покладався залежним від намагніченості лише одного із вузлів (скажімо верхнього лівого), до якого “дотикається” дана плакетка.

### 1.3. Постановка задачі.

#### Магнетокалоричний ефект

Дана робота є продовженням розпочатого у [13] дослідження властивостей спин-1/2  $g_1 - g_2$  одновимірної  $XX$  моделі в поперечному полі, для якої, як вже зазначалось вище, в рамках перетворення Йордана–Вігнера передбачаються точні розв’язки. Результати, отримані для такої спрощеної задачі, можуть виявитися корисними для пояснення певних властивостей систем, які описуються Гайзенберґівським ланцюжком з різними  $g$ -факторами на сусідніх вузлах.

Так, у [13] було встановлено, що логарифмічні сингулярності у кривій намагнічення та статичній сприйнятливості при нульовому полі, до якої приводить періодичність  $g$ -фактора у реальних магнетиках, є наслідком несподіваного ефекту, коли підґратка з меншим  $g$ -фактором починає впорядковуватися в бік, протилежний до поля внаслідок квантової взаємодії між спінами. Згодом енергія цих магнітних іонів у полі переважає і всі магнітні моменти повертаються в напрямку магнітного поля.

У цій же роботі [13] були розраховані також динамічні характеристики, які дозволяють виявити неоднорідність  $g$ -факторів в експериментах з магнітного розсіяння нейтронів та електронного спінового резонансу.

Зокрема, для конфігурації ЕСР Фойгта модель однорідних  $g$ -факторів ( $g_1 = g_2$ ) не демонструє жодного відгуку. У випадку ж різних  $g_1$  і  $g_2$  було встановлено, що відповідна інтенсивність поглинання може бути ненульовою, причому при достатньо великих частотах вона має сингулярність ван Хова. Для конфігурації ЕСР Фарадея спектр поглинан-

ня з відхиленням від однорідного випадку демонструє подвоєння резонансної лінії.

Базуючись на результатах, отриманих у [13], тут буде проведено вивчення магнетокалоричного ефекту (МКЕ) як при  $g_1 g_2 > 0$ , так і при  $g_1 g_2 \leq 0$ . Зокрема розрахуємо та проаналізуємо такі важливі характеристики цього ефекту як ізоентропи (див., наприклад, [27, 45–47]), а також інтенсивності адиабатичного охолодження (див., наприклад, [22, 46, 47]). Буде показано, як змінюються вищезгадані величини з відхиленням від однорідного випадку, а також як вони відрізнятимуться при  $g_1 g_2 > 0$ ,  $g_2 = 0$  та  $g_1 g_2 < 0$ .

Треба сказати, що МКЕ, а саме зміна температури магнітного матеріалу при зміні зовнішнього магнітного поля, є відомим ще з кінця XIX століття [48].

Успішний експеримент із адиабатичного розмагнічування, який базується на застосуванні МКЕ, був проведений вперше у 1993 році [49] і зараз подібні за своїм принципом методи є стандартними для отримання низьких та наднизьких температур (див. [50–52]).

На даний час МКЕ приділяється значна увага також і у зв'язку із можливістю створення приладів охолодження, які працюватимуть, зокрема, при кімнатній температурі [53, 54].

Ще однією важливою властивістю магнетокалоричного ефекту є його, так би мовити, реакція [55, 56] на наявність квантового фазового переходу (близькість до квантової критичної точки позначається на МКЕ у низькотемпературній області).

З огляду на задачу, яка розглядається нами, доцільно також згадати, що на сьогодні існує цілий ряд робіт, в яких проводилося дослідження магнетокалоричного ефекту у спінових системах (як одновимірних [22, 27, 45, 46, 57–62], так і двовимірних [63–65]) на основі отриманих для них строгих результатів у рамках різних підходів.

Зокрема у [22] використовуючи одновимірне перетворення Йордана–Вігнера вивчався МКЕ у спін-1/2  $XX$  1D моделі з триспіновими взаємодіями типу  $XZX + YZY$  та  $XZY - YZX$ . У працях [45] та [27] аналізувались ізоентропи для спін-(1/2,  $s$ ) ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга, застосовуючи декоративно-ітераційне перетворення, та для спін-1/2  $XX$  ланцюжка магнетоелектрика з зигзаг геометрією в рамках методу ферміонізації відповідно. У [46] для спін-1/2  $XXZ$  одновимірної

моделі, застосовуючи техніку трансфер-матриць, та у [62] для спін-(1/2, 1) декорованої драбинки Ізінга–Гайзенберга з пилкоподібними жердинами для опису МКЕ будувались окрім ізоентроп також і магнітні параметри Грюнайзена.

## 2. Термодинамічні характеристики квантових спінових ланцюжків із регулярнозмінними $g$ -факторами

Будемо розглядати спін-1/2  $XX$  ланцюжок у поперечному (орієнтованому вздовж осі  $z$ ) магнітному полі у випадку, коли  $g$ -фактор є регулярнозмінним із періодом два. Гамільтоніан моделі має вигляд:

$$H = \sum_{l=1}^{N/2} \left[ -g_1 h s_{2l-1}^z - g_2 h s_{2l}^z + J (s_{2l-1}^x s_{2l}^x + s_{2l-1}^y s_{2l}^y + s_{2l}^x s_{2l+1}^x + s_{2l}^y s_{2l+1}^y) \right]. \quad (1)$$

Тут  $N$  – число спінів у ланцюжку,  $J$  – обмінна взаємодія,  $h$  – зовнішнє магнітне поле ( $h = \mu_B B$ , де  $\mu_B \approx 0,67171 \frac{\text{К}}{\text{Тл}}$  – магнетон Бора, а розмірності полів  $h$  та  $B$  є кельвін та тесла відповідно). Надалі без втрати всеохопності накладемо граничні періодичні умови та приймемо, що  $N$  є парним.

В рамках одновимірного перетворення Йордана–Вігнера [11] задача зводиться до гамільтоніана невзаємодіючих безспінових ферміонів. У імпульсному просторі матимемо [13]:

$$H = \sum_{-\pi \leq \kappa < \pi} \Lambda_\kappa \left( \alpha_\kappa^\dagger \alpha_\kappa - \frac{1}{2} \right),$$

$$\Lambda_\kappa = -g_+ h + \text{sgn}(J \cos \kappa) \sqrt{J^2 \cos^2 \kappa + g_-^2 h^2}, \quad (2)$$

$$g_\pm = \frac{g_1 \pm g_2}{2},$$

де  $\alpha_\kappa^\dagger$  та  $\alpha_\kappa$  є операторами народження і знищення ферміона з квазіімпульсом  $\kappa = 2\pi l/N$  ( $l = -N/2, \dots, N/2 - 1$ ), а  $\Lambda_\kappa$  – спектр елементарних збуджень.

Як вже було сказано вище, для задачі (2) термодинамічні та поперечні динамічні характеристики отримуються аналітично, причому точно, в той час, як для розрахунку поздовжніх динамічних властивостей необхідно застосовувати числові методи (див. [13]).

З точки зору досліджень, які проводяться у даній роботі, важливо нагадати, що при  $g_1 g_2 > 0$  у основному стані зі зміною магнітного поля відбуваються фазові переходи з фази безщільної спінової рідини у фазу з насиченою намагніченістю при  $h = h_s$ , де  $h_s = \pm |J| / \sqrt{g_1 g_2}$  є полями насичення [12, 13]. А от при  $g_1 g_2 \leq 0$  система при нульовій температурі не терпить зі зміною  $h$  жодного квантового фазового переходу [13] і перебуває у фазі, у якій рівень Фермі знаходиться у забороненій зоні між двома гілками спектра, причому  $\langle s_1^z \rangle = -\langle s_2^z \rangle$  ( $\langle s_1^z \rangle$  та  $\langle s_2^z \rangle$  – середні значення  $z$ -компоненти спіна двох підґраток). Слід відзначити, що намагніченість у задачі з регулярнозмінними факторами  $g_1$  та  $g_2$ , очевидно, є такою:  $m = \frac{1}{2}(g_1 \langle s_1^z \rangle + g_2 \langle s_2^z \rangle)$ .

У термодинамічній границі на основі (2) легко отримати вільну енергію з розрахунку на одну частинку [13]:

$$f(T, h) = -T \ln \text{Tr} e^{-H/T} = -\frac{T}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \ln \left( 2 \cosh \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \right) \quad (3)$$

(ми поклали  $k_B = 1$ ). А на основі (3) можемо одержати інші термодинамічні величини, зокрема намагніченість, ентропію та теплоємність (усі з розрахунку на частинку):

$$m(T, h) = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial h} = \frac{1}{4\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \tanh \left( \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \right) \times \left[ \frac{\text{sgn}(J \cos \kappa) g_-^2 h}{\sqrt{J^2 \cos^2 \kappa + g_-^2 h^2}} - g_+ \right], \quad (4)$$

$$S = -\frac{\partial f(T, h)}{\partial T} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \left[ \ln \left( 2 \cosh \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \right) - \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \tanh \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \right], \quad (5)$$

$$c(T, h) = T \frac{\partial S(T, h)}{\partial T} = \frac{1}{8\pi T^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \left[ \Lambda_\kappa / \cosh \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \right]^2. \quad (6)$$

Приведемо тут також вираз для частинної похідної  $\frac{\partial m(T, h)}{\partial T}$ :

$$\frac{\partial m(T, h)}{\partial T} = -\frac{1}{8\pi T^2} \int_{-\pi}^{\pi} d\kappa \Lambda_\kappa \cosh^{-2} \left( \frac{\Lambda_\kappa}{2T} \right) \times$$

$$\times \left[ \frac{\text{sgn}(J \cos \kappa) g_-^2 h}{\sqrt{J^2 \cos^2 \kappa + g_-^2 h^2}} - g_+ \right]. \quad (7)$$

Таким чином ми маємо в явному вигляді всі необхідні вирази для розрахунку деяких важливих характеристик магнетокалоричного ефекту: ізоентроп, а також інтенсивності адіабатичного охолодження  $\left(\frac{\partial T}{\partial h}\right)_S$ , або ж параметра Грюнайзена

$$\Gamma_h = \frac{1}{T} \left( \frac{\partial T}{\partial h} \right)_S = -\frac{1}{c(T, h)} \frac{\partial m(T, h)}{\partial T}$$

(див., наприклад, роботи [22, 27, 46, 47, 66–69]).

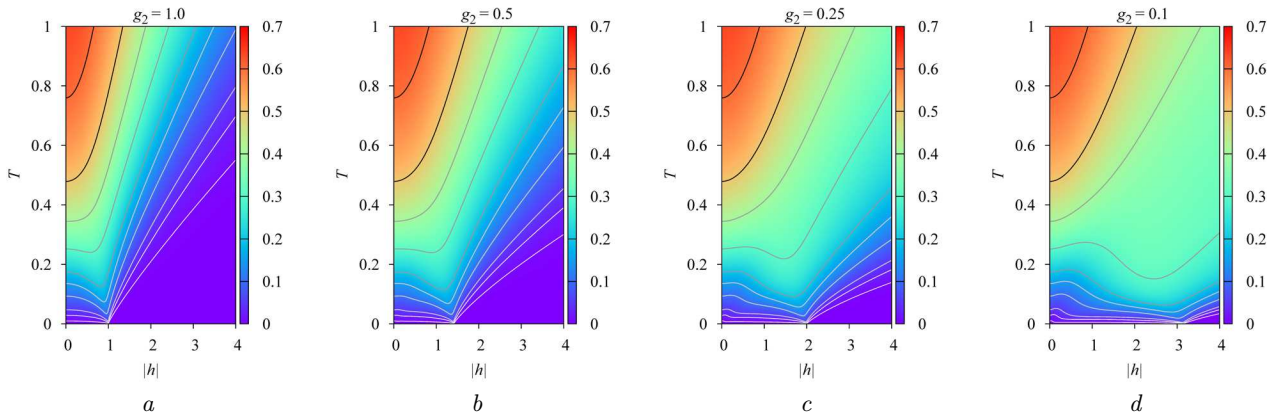
### 3. Результати числових розрахунків

Зупинимося тепер коротко на результатах числових розрахунків. Надалі без втрати всеохопності покладемо  $g_1 = 1$ ,  $J = 1$ . Також обмежимося такими значеннями  $g_2$ :  $g_2 \in [-1, 1]$ .

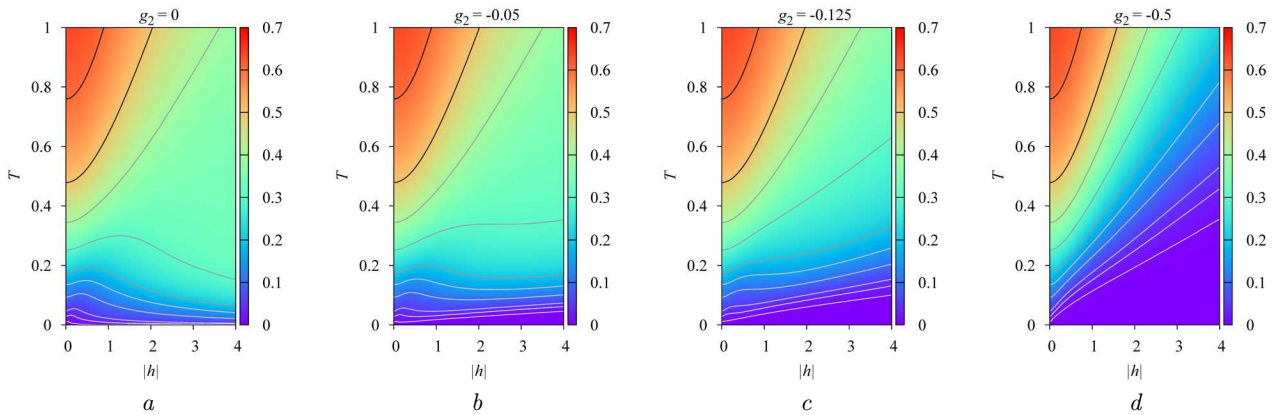
Магнетокалоричний ефект в однорідній системі ( $g_1 = g_2$ ) достатньо детально вивчений у роботі [22]. Тут ми дослідимо вплив неоднорідності спочатку на адіабатичну зміну температури зі зміною магнітного поля, а потім на інтенсивності адіабатичного охолодження.

Як було сказано вище, при  $g_2 > 0$  у основному стані відбуваються квантові фазові переходи при  $h = h_s$ . Це проявляється у магнетокалоричному ефекті у низькотемпературній області (див. рис. 1): ізоентропи мають достатньо різкі нахили поблизу цих критичних магнітних полів (мають місце явно виражені мінімуми в адіабатичних залежностях температури від  $h$ ). При  $g_2 \leq 0$  система в основному стані зі зміною магнітного поля вже не терпить жодного фазового переходу (насичення досягається лише при  $h \rightarrow \infty$ ). Тому в ізоентропах при малих  $S$  (див. рис. 2) вже немає вищезгаданих мінімумів, пов'язаних із квантовими фазовими переходами (як це було при додатних  $g_2$ ).

Проаналізуємо більш детально, як впливає неоднорідність на адіабатичну зміну температури зі зміною магнітного поля, що особливо проявляється при низьких температурах. На рис. 1, 2 представлено градієнтні зображення ентропії як функції магнітного поля та температури при різних значеннях параметра  $g_2$ . Лінії з постійною ентропією відповідають таким її значенням:  $S = 0,01, 0,03$  (білі криві);  $0,05, 0,1, 0,15$  (світло-сірі криві);



**Рис. 1.** Градієнтні зображення ентропії як функції магнітного поля та температури при  $g_2 = 1$  (a), 0,5 (b), 0,25 (c) та 0,1 (d). Лінії з постійною ентропією відповідають таким її значенням:  $S = 0,01, 0,03$  (білі криві); 0,05, 0,1, 0,15 (світло-сірі криві); 0,2, 0,3, 0,4 (темно-сірі криві); 0,5, 0,6 (чорні криві). Квантові фазові переходи відбуваються при  $h_s = 1, 1,414, 2$  та 3,162 для  $g_2 = 1, 0,5, 0,25$  та 0,1 відповідно



**Рис. 2.** Градієнтні зображення ентропії як функції магнітного поля та температури при  $g_2 = 0$  (a),  $-0,05$  (b),  $-0,125$  (c) та  $-0,5$  (d). Лінії з постійною ентропією відповідають таким її значенням:  $S = 0,01, 0,03$  (білі криві); 0,05, 0,1, 0,15 (світло-сірі криві); 0,2, 0,3, 0,4 (темно-сірі криві); 0,5, 0,6 (чорні криві)

0,2, 0,3, 0,4 (темно-сірі криві); 0,5, 0,6 (чорні криві). “Рухаючись” по ізоентропі маємо адіабатичну зміну температури зі зміною магнітного поля. З наведених рисунків можна бачити основний аспект зміни магнетокалоричного ефекту зі зміною фактора  $g_2$ . Зауважимо, що оскільки ентропія є парною функцією магнітного поля, то у своєму аналізі обмежимося лише додатними значеннями  $h$ . При цьому зрозуміло, що при  $h = 0$  ізоентропи мають екстремуми.

Розглянемо спочатку випадок  $g_2 > 0$  (рис. 1). При  $g_2 = 1$  ізоентропи, побудовані для малих  $S$  ( $S = 0,01, \dots, 0,3$ ), мають по одному максимуму та мінімуму при  $h = 0$  та при значенні поля відносно

близькому до  $h_s$  відповідно. Чим меншою є ентропія, тим ця близькість до  $h_s$  є більшою.

При  $g_2 \in ]0, 1[$  ізоентропи для малих значень  $S$  мають мінімуми при  $h = 0$  (на відміну від максимумів у однорідному випадку) та при  $h$  близькому до  $h_s$  (аналогічно, як у випадку  $g_2 = 1$ ). Окрім того може бути ще по одному мінімуму між згаданими вище. Цей додатковий мінімум на ізоентропі й, відповідно, два максимуми появляються лише при достатньо малих  $S$ , причому, чим меншим є  $g_2$ , тим більшою є ця ентропія, при якій мають місце додаткові екстремуми. Так, із рис. 1 видно, що при  $g_2 = 0,5$  та 0,25 такі три додаткові екстремуми має лише лінія з постійною ентропією  $S = 0,01$ , а

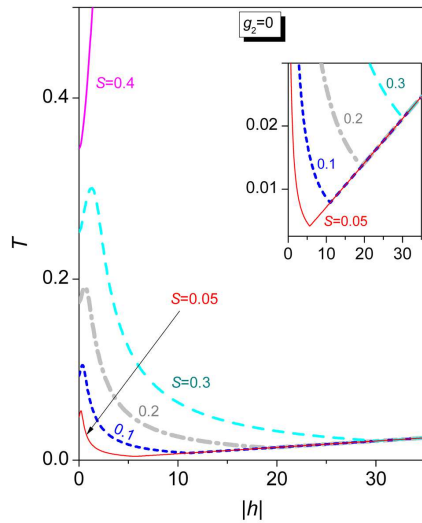


Рис. 3. Ізоентропи у випадку  $g_2 = 0$ , побудовані для різних значень ентропії:  $S = 0,05, 0,1, 0,2, 0,3, 0,4$

при  $g_2 = 0,1$  їх мають ізоентропи, побудовані як для  $S = 0,01$ , так і для  $S = 0,03$ .

Для дещо вищих значень ентропії на лініях, які відповідають їй постійному значенню, між мінімумами при  $h = 0$  та тими, які пов'язані із квантовим фазовим переходом є лише по одному максимуму (див. результати при  $g_2 = 0,5$  для  $S = 0,03, \dots, 0,15$ ; при  $g_2 = 0,25$  для  $S = 0,03, \dots, 0,3$ ; при  $g_2 = 0,1$  для  $S = 0,05, \dots, 0,3$ ).

Тобто, наприклад, при  $g_2 = 0,25$  та  $S = 0,01$  зі збільшенням абсолютного значення магнітного поля в системі відбуваються послідовно такі адіабатичні процеси: нагрівання, різке охолодження, повільне нагрівання, охолодження (швидкість якого зростає із наближенням до  $|h_s|$ ) і потім досить швидко нагрівання. А при тому ж  $g_2 = 0,25$ , але для  $S = 0,03$  можемо спостерігати відповідно: нагрівання, потім охолодження (причому досить швидко як при малих  $|h|$ , так і при полях близьких до  $|h_s|$ ) і врешті швидко нагрівання.

Тепер зупинимося на випадку  $g_2 \leq 0$  (рис. 2). При  $g_2 = 0$  та  $-0,05$  ізоентропи, побудовані для малих  $S$ , є немонотонними функціями магнітного поля, у яких наявні по два мінімуми (один із яких при  $h = 0$ ) та по одному максимуму. Якщо при  $g_2 = 0$  вони є такими для  $S = 0,01, \dots, 0,3$  (див. також рис. 3), то при  $g_2 = -0,05$  вже лише ізоентропи для  $S = 0,01, \dots, 0,2$  мають по три таких екстремуми, в той час, як для  $S = 0,3$  залишається

лише один мінімум при  $h = 0$ . Цікавим є те, що при  $g_2 = 0$  для ліній з постійною ентропією точки мінімумів при  $h \neq 0$  є також і точками зламів. Більше того, після точок цих зламів ізоентропи, що відповідають різним значенням ентропії, накладаються (див. рис. 3).

При  $g_2 = -0,125$  та  $-0,5$  ізоентропи, побудовані для малих  $S$ , вже мають лише по одному мінімуму при  $h = 0$  (див. рис. 2). І якщо у випадку  $g_2 = -0,125$  на лініях з постійною ентропією для  $S = 0,01, \dots, 0,2$  можна бачити чіткі перегини при малих значеннях  $h$  (свого роду “залишки” екстремумів при більших  $g_2$ ; порівняй випадки  $g_2 = -0,05$  та  $-0,125$ ), то при  $g_2 = -0,5$  таких перегинів немає.

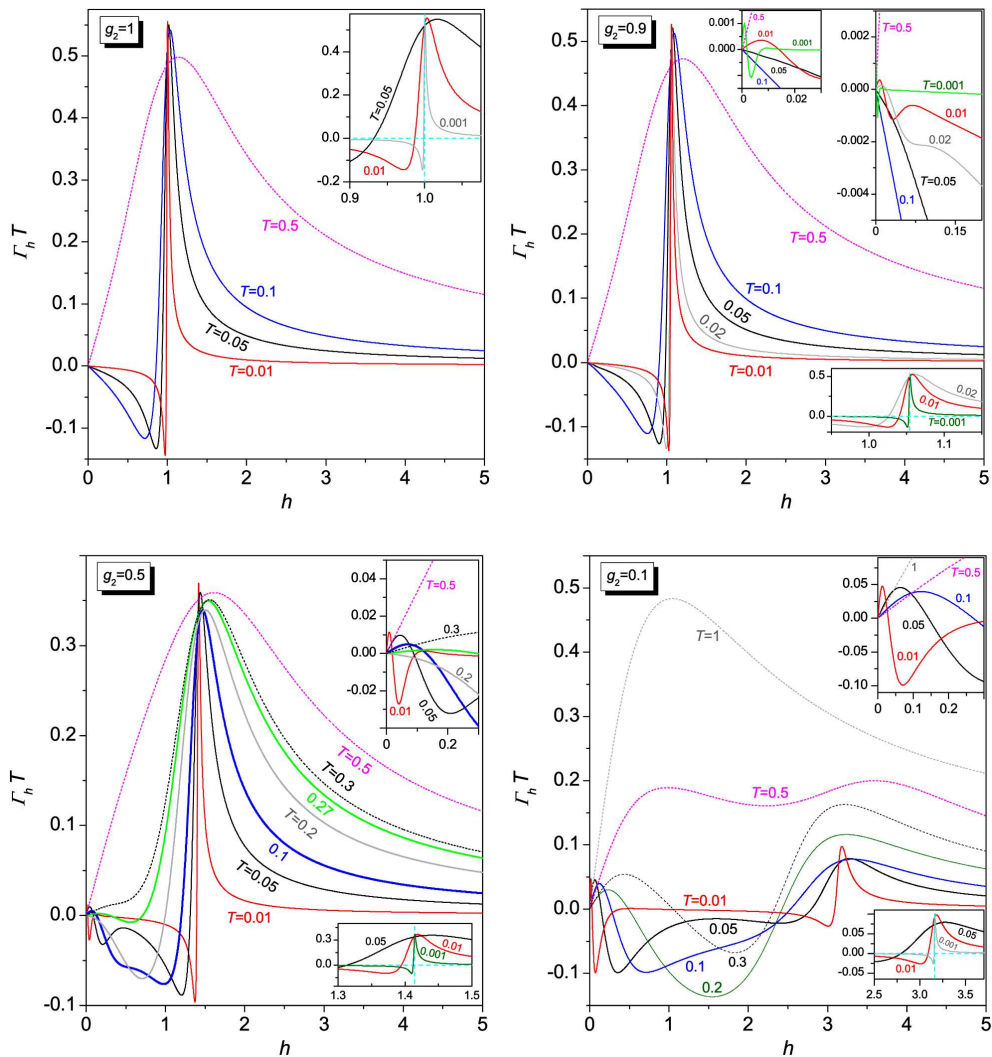
Проаналізуємо тепер, як змінюються польові залежності інтенсивності адіабатичного охолодження  $(\frac{\partial T}{\partial h})_S$  (або ж параметр Грюнайзена  $\Gamma_h$ ) зі зміною  $g_2$  та температури (див. рис. 4–6). Оскільки  $\Gamma_h(h)$  є непарною функцією магнітного поля, то обмежимося у своєму дослідженні додатними  $h$ .

Відомо, що у системах, в яких мають місце квантові фазові переходи, у випадку низьких температур  $\Gamma_h(h)$  змінює знак при  $h$  близькому до критичного поля (див. роботу [22] і посилання у ній). Зрозуміло, що чим нижчою є  $T$ , тим поле, при якому відбувається вищезгадана зміна знака, буде ближчим до  $h_s$ .

Це можна бачити з приведених рисунків для  $g_2 = 1, 0,9, 0,5, 0,1$  та  $0,03$ . При достатньо ж високих температурах  $\Gamma_h(h)$  як для  $g_2 > 0$ , так і для  $g_2 < 0$  вже не змінює свого знака та є додатним на всьому проміжку  $h \in ]0, \infty[$ .

Нагадаємо, що у однорідному випадку при низьких температурах ( $T = 0,01, 0,05$  та  $0,1$ ) параметр Грюнайзена як функція магнітного поля має по одному мінімуму та по одному максимуму, а при високих ( $T = 0,5$ ) – лише максимум. При тому при малих  $T$  параметр  $\Gamma_h(h)$  перетинає вісь абсцис при  $h > 0$  лише один раз.

Невелике відхилення від однорідності (випадок  $g_2 = 0,9$ ) приводить до появи додаткових екстремумів при низьких температурах: трьох при  $T = 0,001$  та  $0,01$ , або одного при  $T = 0,02$ . Тобто при  $T = 0,001$  та  $0,01$  польова залежність параметра Грюнайзена має три максимуми і два мінімуми, а при  $T = 0,02$  – два максимуми і один мінімум. Більше того, при  $T = 0,001$  наявні аж три додаткові точки, де  $\Gamma_h(h)$  змінює свій знак. При



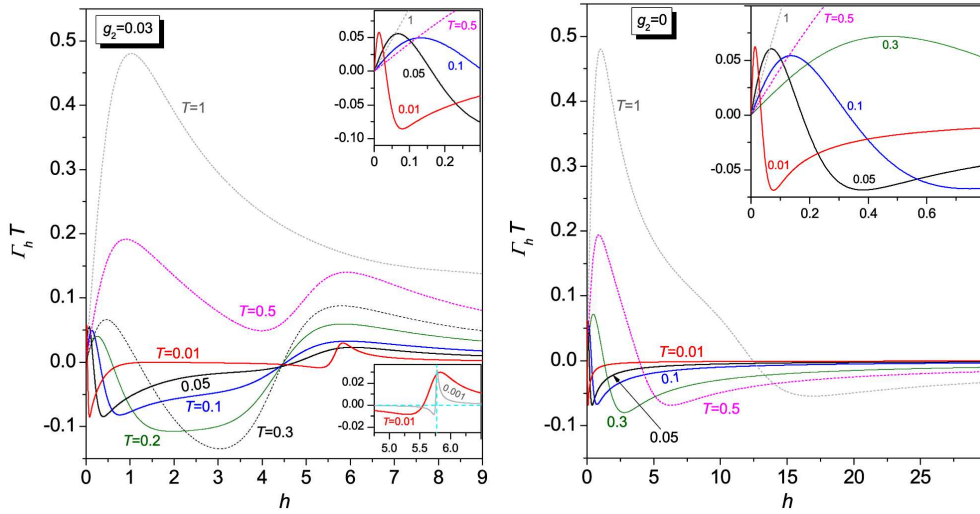
**Рис. 4.** Польові залежності інтенсивності адиабатичного охолодження  $(\partial T/\partial h)_S = T\Gamma_h$  при  $g_2 = 1, 0,9, 0,5$  та  $0,1$  і різних значеннях температури. Перетини вертикальних та горизонтальних штрихованих прямих на вкладених рисунках відповідають точкам, в яких  $\Gamma_h$  при  $T$  близькому до нуля змінює знак, що пов'язано з квантовими фазовими переходами ( $h_s = 1, 1,054, 1,414$  та  $3,162$  для  $g_2 = 1, 0,9, 0,5$  та  $0,1$  відповідно)

температурах ж  $T = 0,01$  та  $0,02$  маємо по одній такій додатковій точці. Слід зауважити, що ці додаткові точки, у якій  $\Gamma_h(h)$  дорівнює нулю (при менших  $h$ ), не є пов'язаними з жодним квантовим фазовим переходом. Водночас якраз остання зміна знака параметра Грюнайзена зі збільшенням магнітного поля (відповідно четверта для  $T = 0,001$  і друга для  $T = 0,01$  та  $0,02$ ) при  $h$  достатньо близьких до  $h_s$  і свідчить про наявність фазового переходу в основному стані (подібно, як і для інших

значень  $g_2 \in ]0, 1[$ ). При  $T = 0,05$  та  $0,1$  параметр  $\Gamma_h(h)$  вже має лише по два екстремуми та змінює знак на проміжку  $h \in ]0, \infty[$  лише один раз (аналогічно, як для  $g_2 = 1$  при  $T = 0,01, 0,05$  та  $0,1$ ). Зрозуміло, що ця зміна знака також пов'язана з наявністю квантового фазового переходу.

Випадок  $g_2 = 0,5$  є дещо складнішим від розглянутого вище. При  $T = 0,01$  та  $0,05$  є три додаткові екстремуми, при  $T = 0,1$  та  $0,27$  – один, а при проміжній температурі  $T = 0,2$  немає жодного (тобто





**Рис. 5.** Польові залежності інтенсивності адіабатичного охолодження  $(\partial T/\partial h)_S = T\Gamma_h$  при  $g_2 = 0,03$  та  $0$  і різних значеннях температури. Перетини вертикальної та горизонтальної штрихованих прямих на нижньому вкладеному рисунку на лівій панелі відповідає точці, в якій  $\Gamma_h$  при  $T$  близькому до нуля змінює знак, що пов'язано з квантовим фазовим переходом ( $h_s = 5,773$  для  $g_2 = 0,03$ )

при  $T = 0,2$  параметр  $\Gamma_h(h)$  має лише по одному мінімуму та максимуму, аналогічно, як для  $g_2 = 1$  при низьких температурах, а також для  $g_2 = 0,9$  при  $T = 0,05$  та  $0,1$ ). Таким чином видно, що основною відмінністю між випадками  $g_2 = 0,5$  та  $0,9$  є те, що для  $g_2 = 0,9$  з ростом температури кількість екстремумів  $\Gamma_h(h)$  може лише зменшуватись, тим часом як для  $g_2 = 0,5$  вона може також один раз і збільшитись (з двох до трьох). Тепер коротко щодо кількості точок, у яких параметр Грюнаїзена змінює знак. При  $T = 0,01$  для  $g_2 = 0,5$  наявні три додаткові точки, де  $\Gamma_h(h) = 0$  (разом із точкою, близькою до  $h_s$ , їх при  $h > 0$  є чотири).

При температурах ж  $T = 0,05, 0,1$  та  $0,27$  параметр  $\Gamma_h(h)$  перетинає вісь абсцис при  $h > 0$  двічі, в той час як при  $T = 0,2$  – лише один раз.

З точки зору зміни кількості екстремумів у польових залежностях  $\Gamma_h$  з підвищенням температури випадки  $g_2 = 0,1$  та  $0,03$  є дещо подібними до випадку  $g_2 = 0,9$ . Так, для  $g_2 = 0,1$  при  $T = 0,01$  та  $0,05$ , а також для  $g_2 = 0,03$  при  $T = 0,01$  параметр Грюнаїзена має три максимуми та два мінімуми (аналогічно, як для  $g_2 = 0,9, T = 0,01$ ). Для  $g_2 = 0,1$  при  $T = 0,1, 0,2, 0,3$  та  $0,5$ , а також для  $g_2 = 0,03$  при  $T = 0,05, 0,1, 0,2, 0,3$  та  $0,5$  він має два максимуми та один мінімум (так, як для  $g_2 = 0,9, T = 0,02$ ).

Проте у розглянутих випадках з сильним відхиленням від однорідності ( $g_2 = 0,1$  та  $0,03$ ), на відміну від випадків, близьких до однорідного ( $g_2 = 0,9$ ) та однорідного, не існує температури, коли  $\Gamma_h(h)$  має при додатних полях по одному мінімуму та максимуму. Тобто “перехід” від кривої  $\Gamma_h(h)$  з кількома екстремумами до кривої з одним максимумом відбувається при  $g_2 = 0,1$  та  $0,03$  інакше, аніж при  $g_2 = 1$  та  $0,9$ . У випадках з сильним відхиленням від однорідності другий та третій екстремуми (при вищих  $h$ ) зі збільшенням температури, так би мовити, “зливаються” і зникають. А у випадках із слабким відхиленням від однорідності та однорідному перший екстремум з підвищенням  $T$  стає менш вираженим, наближається до початку координат і врешті зникає.

Слід також сказати, що короткий опис поведінки перших двох екстремумів (максимуму та мінімуму при малих  $h$ ) у польових залежностях інтенсивності адіабатичного охолодження зі збільшенням температури буде зроблений пізніше, коли аналізуватимемо випадок  $g_2 = 0$ .

Якщо розглядати зміну кількості точок, де  $\Gamma_h(h) = 0$ , то з рис. 4 та лівої панелі на рис. 5 видно, що для  $g_2 = 0,1$  та  $0,03$  ситуації дещо відрізняються між собою, а також дечим подібні, а в дечому відмінні від тих, які є для випадків  $g_2 = 0,9$

та 0,5. Так, для  $g_2 = 0,1$  та  $0,03$  при  $T = 0,01$  параметр  $\Gamma_h(h)$ , маючи п'ять екстремумів, змінює знак при  $h > 0$  чотири рази (як це є для  $g_2 = 0,9$  при  $T = 0,001$  та для  $g_2 = 0,5$  при  $T = 0,01$ ). Для  $g_2 = 0,1$  при  $T = 0,05$  та для  $g_2 = 0,03$  при  $T = 0,02$   $\Gamma_h(h)$  також з п'ятьма екстремумами перетинає вісь абсцис на проміжку  $h \in ]0, \infty[$  уже лише двічі (аналогічно, як для  $g_2 = 0,9$  при  $T = 0,01$  та для  $g_2 = 0,5$  при  $T = 0,05$ ). Для  $g_2 = 0,1$  при  $T = 0,1, 0,2$  та  $0,3$ , а також для  $g_2 = 0,03$  при  $T = 0,05, 0,1, 0,2$  та  $0,3$  параметр Грюнайзена, маючи три екстремуми, змінює знак два рази (як це є для  $g_2 = 0,9$  при  $T = 0,02$  та для  $g_2 = 0,5$  при  $T = 0,1, 0,27$ ). А от у випадках  $g_2 = 0,1$  та  $0,03$  при  $T = 0,5$   $\Gamma_h(h)$ , будучи немонотонною функцією з трьома екстремумами, є додатним на всьому проміжку  $h > 0$  (подібної поведінки параметра Грюнайзена немає ні для  $g_2 = 0,9$ , ні для  $g_2 = 0,5$ ). З іншого боку, у випадках з сильним відхиленням від однорідності ( $g_2 = 0,1$  та  $0,03$ ) немає температури, при якій  $\Gamma_h(h)$  змінює знак при  $h > 0$  один раз, що можна спостерігати при певних  $T$  для  $g_2 = 1, 0,9$  та  $0,5$ . І наостанок, при низьких температурах ( $T = 0,01$ ) останні два екстремуми (між якими знаходиться точка  $\Gamma_h(h) = 0$ , пов'язана з квантовим фазовим переходом) для  $g_2 = 0,03$  є значно менш "вираженими", аніж два перші, що не скажеш для випадку  $g_2 = 0,1$ . Для  $g_2 = 0,9$  та  $0,5$  при  $T = 0,01$  якраз ці останні два екстремуми значно більш "виражені" у порівнянні з двома першими.

Підсумуємо коротко результати для інтенсивності адіабатичного охолодження  $(\frac{\partial T}{\partial h})_S$ , або ж пов'язаного з ним параметра Грюнайзена  $\Gamma_h$  у випадку  $g_2 > 0$  (рис. 4 та ліва панель на рис. 5), коли в системі при  $T \rightarrow 0$  має місце квантовий фазовий перехід [13]. Із проведеного вище аналізу видно, що зміна поведінки як одної, так і другої зі згаданих вище характеристик як функції магнітного поля зі збільшенням температури є різною для різних випадків – однорідного, близького до однорідного, випадку малого додатного  $g_2$ , а також проміжному між двома останніми (проміжний випадок між сильним та слабким відхиленням від однорідності). Однак слід зауважити, що при дуже великих полях ситуація є однозначною: обидві функції для будь-яких додатних  $g_2$  та скінченних температур є спадними, причому при  $h \rightarrow \infty$  їх значення прямують до нуля.

Розглянемо тепер, як змінюються польові залежності інтенсивності адіабатичного охолодження (або ж параметр Грюнайзена) зі зміною  $g_2$  та температури у випадку  $g_2 \leq 0$  (див. праву панель на рис. 5 та рис. 6).

Оскільки для таких  $g_2$  в основному стані вже немає фазових переходів зі зміною магнітного поля, то, природно, вже немає і відповідної точки, де відбувається зміна знака  $\Gamma_h(h)$ , і яка пов'язана із квантовим фазовим переходом (як це було при  $g_2$ , більшому від нуля). Водночас при  $g_2 \leq 0$  також відсутні й відповідні екстремуми (мінімум і максимум), між якими у випадку  $g_2 > 0$  та низьких температур знаходилась згадана вище точка  $\Gamma_h(h) = 0$  (при полях, близьких до  $h_s$ ).

Спочатку зупинимось на результатах для  $g_2 = 0$ , які відмінні від результатів як для  $g_2 > 0$ , так і для  $g_2 < 0$ . У цьому ( $g_2 = 0$ ) випадку параметр Грюнайзена при скінченних температурах має по одному максимуму та мінімуму і перетинає вісь абсцис при  $h > 0$  один раз. Тобто при великих полях  $\Gamma_h(h)$  є зростаючою функцією при будь-яких скінченних  $T$  (на відміну від випадків  $g_2 \neq 0$ ), причому  $\lim_{h \rightarrow \infty} \Gamma_h(h) = 0$ . Слід ще зауважити, що зі збільшенням температури максимальне значення у польовій залежності інтенсивності адіабатичного охолодження зміщується в напрямку більших  $h$ . Притому при малих температурах із її ростом це максимальне значення несуттєво зменшується, а при великих  $T$  – досить різко збільшується.

Подібна ситуація спостерігається також для перших максимумів  $(\partial T / \partial h)_S = T \Gamma_h(h)$  й у випадках від'ємних та невеликих додатних значень  $g_2$ .

Мінімальне ж значення в польовій залежності інтенсивності адіабатичного охолодження з ростом температури міняється при великих  $T$  порівняно досить слабо, а от його зміщення у напрямку більших полів відбувається швидше, аніж для максимумів.

При цьому при достатньо низьких та високих температурах із її зростанням абсолютне значення мінімуму  $(\partial T / \partial h)_S = T \Gamma_h(h)$  зменшується, а при проміжних  $T$  – збільшується.

Децю подібну поведінку демонструють також перші мінімуми й у випадках невеликих за модулем значень  $g_2$  [як додатних ( $g_2 = 0,1, 0,03$ ), так і від'ємних ( $g_2 = -0,01$ ): із підвищенням температури цей перший мінімум  $(\partial T / \partial h)_S = T \Gamma_h(h)$

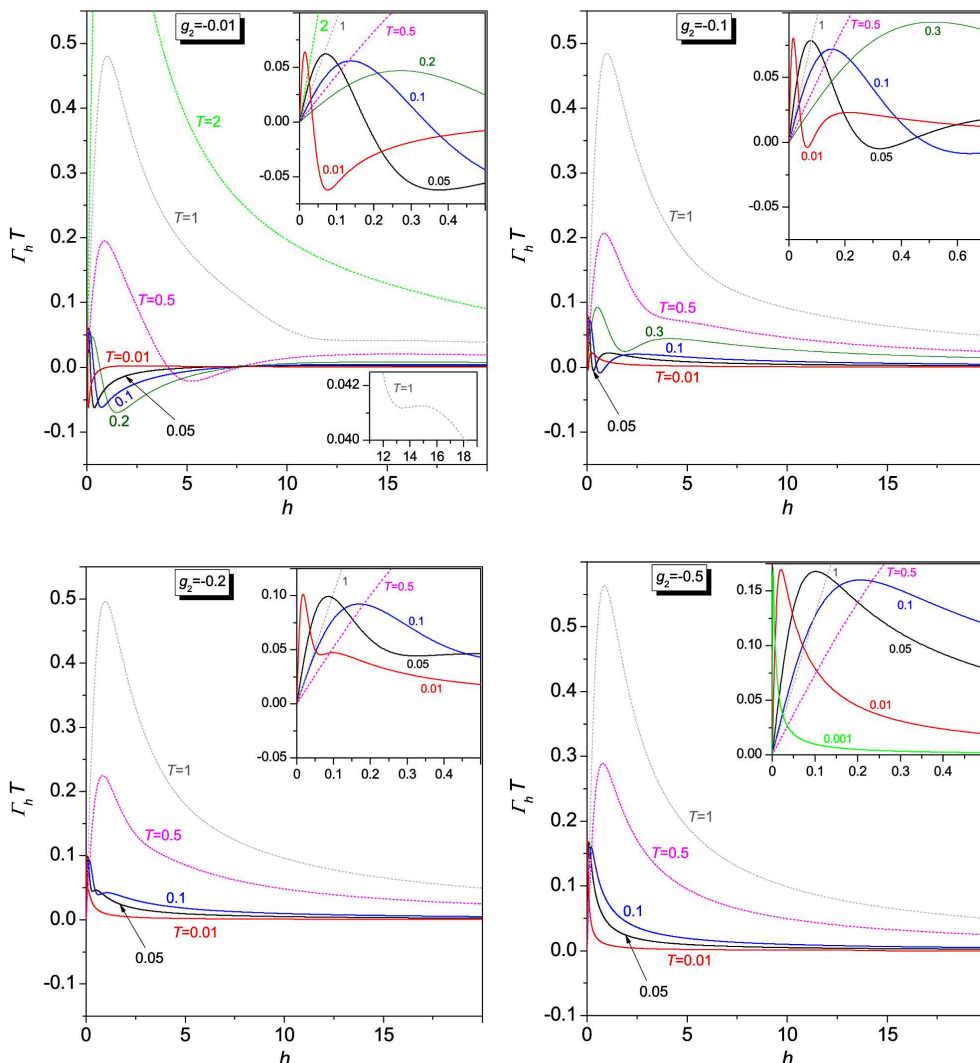


Рис. 6. Польові залежності інтенсивності адиабатичного охолодження  $(\partial T/\partial h)_S = T\Gamma_h$  при  $g_2 = -0,01, -0,1, -0,2$  та  $-0,5$  і різних значеннях температури

спочатку незначно “піднімається”, потім “опускається” і врешті знову починає “підніматися”.

Наприклад, при  $g_2 = 0,1$  перший мінімум для  $T = 0,1$  знаходиться вище, аніж для  $T = 0,01$  та  $T = 0,2$ , але нижче, аніж для  $T = 0,3$ .

Для  $g_2 = -0,01$  та  $-0,1$  при не дуже високих температурах параметр Грюнайзена має три екстремуми. Притому при нижчих  $T$  він перетинає вісь абсцис при  $h > 0$  двічі, а при вищих не міняє свого знака. Так,  $\Gamma_h(h)$  при  $T = 1$  для  $g_2 = -0,01$  та при  $T = 0,3$  для  $g_2 = -0,1$  маючи три екстремуми є додатним на всьому проміжку  $h \in ]0, \infty[$ , в той

час як, наприклад, при  $T = 0,5$  для  $g_2 = -0,01$  або при  $T = 0,3$  для  $g_2 = -0,1$  параметр Грюнайзена змінює знак два рази. При достатньо високих температурах ( $T = 2$  та  $0,5$  для  $g_2 = -0,01$  та  $-0,1$  відповідно)  $\Gamma_h(h)$  має лише один екстремум, аналогічно, як це є при високих  $T$  для випадку додатних  $g_2$ . Якщо порівнювати результати для  $g_2 = -0,01$  та  $-0,1$  між собою, то видно, що для  $g_2 = -0,1$  при низьких температурах (наприклад,  $T = 0,01$  та  $0,1$ ) абсолютне значення мінімуму  $\Gamma_h(h)$  є значно меншим від значення першого максимуму, чого не скажеш про випадок  $g_2 = -0,01$ .

Для  $g_2 = -0,2$  кількості екстремумів у польових залежностях  $\Gamma_h$  міняється з підвищенням температури так само, як для  $g_2 = -0,01$  та  $-0,1$ . Тобто, при низьких температурах параметр Грюнайзена має три екстремуми, а при високих – один. Водночас у випадку  $g_2 = -0,2$ , на відміну від розглянутих вище випадків  $g_2 = -0,01$  та  $-0,1$ ,  $\Gamma_h(h)$  не змінює свого знака при  $h > 0$  навіть при досить низьких температурах.

Наостанок розглянемо приведені на рис. 6 результати для  $g_2 = -0,5$ . У цьому випадку параметр Грюнайзена як функція магнітного поля має лише один максимум навіть при низьких температурах і є додатним на всьому проміжку  $h > 0$ . Така ж поведінка  $\Gamma_h(h)$  буде і при максимальному відхиленні від однорідності ( $g_2 = -1$ ).

Підсумуємо коротко результати для інтенсивності адіабатичного охолодження  $(\frac{\partial T}{\partial h})_S$ , або ж пов'язаного з ним параметра Грюнайзена  $\Gamma_h$  у випадку  $g_2 \leq 0$  (права панель на рис. 5 та рис. 6), коли система в основному стані при будь-яких магнітних полях перебуває у тій же фазі, у якій рівень Фермі лежить між двома гілками спектра [13]. Дослідження показало, що з точки зору того, як міняється кількість екстремумів та кількість перетинів осі абсцис зі збільшенням температури у одній, або у другій польових залежностях згаданих вище характеристик, випадок  $g_2 = 0$ , випадки малого та великого за модулем значення  $g_2$ , а також проміжний між двома останніми відрізняються між собою. Більше того, лише при  $g_2$  рівному нулю інтенсивності адіабатичного охолодження і, відповідно, параметр Грюнайзена при сильних додатних магнітних полях є від'ємними.

#### 4. Висновки

Проведено дослідження магнетокалоричного ефекту у одновимірній спин-1/2 XX моделі з регулярнозмінними  $g$ -факторами ( $g_1$  та  $g_2$ ). У випадку, коли вони мають однакові знаки, зі зміною магнітного поля  $h$  у основному стані відбуваються квантові фазові переходи між фазами з насиченою намагніченістю та безщільною спіновою рідиною. Це проявляється у магнетокалоричному ефекті. Зокрема поблизу цих критичних магнітних полів  $h_s$  ізоентропи, які відповідають малим значенням ентропії  $S$ , мають мінімуми, а параметр Грюнайзена  $\Gamma_h(h)$ , розрахований для низьких темпе-

ратур, змінює свій знак. Зауважимо, що для кращого сприйняття приведені нижче висновки стосуватимуться проміжку  $h \geq 0$  (оскільки ентропія – парна функція  $h$ , а  $\Gamma_h(h)$  – непарна). Також треба сказати, що при аналізі ізоентроп та параметрів Грюнайзена ми обмежувались значеннями ентропії  $S > 0,001$  та температури  $T > 0,001$  відповідно.

Встановлено, що при  $g_1 g_2 > 0$  при відхиленні від однорідного випадку ( $g_1 \neq g_2$ ) в ізоентропах, побудованих для малих  $S$ , появляються додаткові екстремуми: три для достатньо малих значень ентропії або ж один для дещо більших  $S$ . Більше того, у неоднорідному випадку криві, які відповідають постійній ентропії, при  $h = 0$  мають мінімум, в той час як у однорідному при  $h = 0$  для малих значень  $S$  вони мають максимуми.

У випадку, коли якийсь один із двох  $g$ -факторів дорівнює нулю, та у випадку, коли  $g_1$  та  $g_2$  мають різні знаки, а їх абсолютні значення відрізняються приблизно не менше ніж на порядок, ізоентропи, які відповідають малим значенням ентропії, мають окрім мінімуму при  $h = 0$  ще два екстремуми при  $h > 0$ . Ці два екстремуми при  $h > 0$  у випадку  $g_1 g_2 < 0$  є більш явно вираженими при не дуже малих значеннях  $S$  і мають, так би мовити, ту саму природу, що і перші два додаткові екстремуми (при  $0 < h \ll h_s$ ) у випадку, коли  $g_1$  та  $g_2$  мають однаковий знак та різні значення.

Показано, що при низьких температурах відхилення від однорідності  $g$ -факторів, які притому зберігають однакові знаки, приводить до появи трьох додаткових значень магнітного поля, при яких параметр Грюнайзена  $\Gamma_h(h)$  перетинає вісь абсцис, і відповідно до появи трьох додаткових екстремумів у польовій залежності цього параметра (як відомо, у однорідному випадку  $\Gamma_h(h)$  при низьких  $T$  має лише два екстремуми і дорівнює нулю тільки при  $h = 0$  та при  $h$  близькому до  $h_s$ ).

Важливо відзначити, що у випадку суттєвої неоднорідності  $g$ -факторів екстремуми  $\Gamma_h(h)$  поблизу цих двох додаткових значень поля, де  $\Gamma_h(h)$  змінює знак, є значно більше вираженими, ніж поблизу  $h_s$ .

Окрім того, слід зауважити, що зміна поведінки польової залежності параметра Грюнайзена з підвищенням температури відбувається по-різному для різних значень  $g_2/g_1$ .

Коли один із  $g$ -факторів дорівнює нулю параметр Грюнайзена як функція магнітного поля має

два екстремуми при будь-яких  $T$  та перетинає вісь абсцис при  $h \geq 0$  двічі (перший раз при  $h = 0$ ).

Слід зауважити, що незалежно від температури при дуже великих магнітних полях лише у цьому випадку (коли один із  $g$ -факторів є нульовим) параметр  $\Gamma_h(h)$  є зростаючою функцією, в той час як у випадках з відмінними від нуля обома  $g$ -факторами  $\Gamma_h$  спадає з ростом поля (при великих  $h$  та будь-яких  $T$ ).

При  $g_1 g_2 < 0$  параметри  $\Gamma_h(h)$ , відповідаючи низьким температурам, мають три екстремуми та перетинають вісь абсцис тричі (на проміжку  $h \in [0, \infty)$  лише у випадку, коли абсолютні значення  $g_1$  та  $g_2$  відрізняються приблизно не менше аніж на порядок. Зі зменшенням різниці між  $|g_1|$  та  $|g_2|$  параметр Грюнаїзена (для малих  $T$ ) спочатку зберігає згадані вище три екстремуми, проте вже є додатним на всьому проміжку  $h \geq 0$  ( $\Gamma_h(h) = 0$  лише при  $h = 0$ ). Подальше зменшення різниці між абсолютними значеннями  $g$ -факторів приводить до того, що у польовій залежності  $\Gamma_h$  залишається лише один максимум.

При низькій температурі  $\Gamma_h(h)$  при малих додатних значеннях магнітного поля у випадку  $g_1 \neq g_2$  (не залежно від того, чи  $g$ -фактори мають однакові знаки, чи різні) є зростаючою функцією, водночас як при  $g_1 = g_2$  – спадною.

*Висловлюю подяку Т.М. Верхоляку за інтерес до цієї роботи, допомогу, поради та корисні дискусії.*

1. P. Bhatt, N. Thakur, M. D. Mukadam, S.S. Meena, S.M. Yusuf. One-dimensional Single-Chain molecular magnet with a cross-linked  $\pi$ - $\pi$  coordination network  $\{[\text{Co}^{\text{II}}(\Delta)\text{Co}^{\text{II}}(\Lambda)](\text{ox})_2(\text{phen})_2\}_n$ . *J. Phys. Chem. C* **118**, 1864 (2014).
2. E. Coronado, M. Drillon, A. Fuertes, D. Beltran, A. Mosset, J. Galy. Structural and magnetic study of  $\text{Ni}_2(\text{EDTA})(\text{H}_2\text{O})_4 \cdot 2\text{H}_2\text{O}$ . alternating Landé factors in a two-sublattice 1D system. *J. Am. Chem. Soc.* **108**, 900 (1986).
3. W.-G. Yin, X. Liu, A.M. Tsvelik, M.P.M. Dean, M.H. Upton, J. Kim, D. Casa, A. Said, T. Gog, T.F. Qi, G. Cao, J.P. Hill. Ferromagnetic exchange anisotropy from antiferromagnetic superexchange in the mixed 3d – 5d transition-metal compound  $\text{Sr}_3\text{CuIrO}_6$ . *Phys. Rev. Lett.* **111**, 057202 (2013).
4. W.-G. Yin, C.R. Roth, A.M. Tsvelik. *Spin Frustration and a "Half Fire, Half Ice" Critical Point from Nonuniform g-Factors*. [<https://arxiv.org/abs/1510.00030>].

5. F. Souza, M. L. Lyra, J. Strečka, M.S.S. Pereira. Magnetization processes and quantum entanglement in a spin-1/2 Ising-Heisenberg chain model of a heterotrimetallic Fe-Mn-Cu coordination polymer. *J. Magn. Magn. Mater.* **471**, 423 (2019).
6. W. Van den Heuvel, L.F. Chibotaru. Dysprosium-based experimental representatives of an Ising-Heisenberg chain and a decorated Ising ring. *Phys. Rev. B* **82**, 174436 (2010).
7. M. Oshikawa, I. Affleck. Field-induced gap in  $S=1/2$  antiferromagnetic chains. *Phys. Rev. Lett.* **79**, 2883 (1997).
8. I. Affleck, M. Oshikawa. Field-induced gap in Cu benzoate and other  $S = \frac{1}{2}$  antiferromagnetic chains. *Phys. Rev. B* **60**, 1038 (1999).
9. M. Kenzelmann, C.D. Batista, Y. Chen, C. Broholm, D.H. Reich, S. Park, Y. Qiu.  $S=\frac{1}{2}$  chain in a staggered field: High-energy bound-spinon state and the effects of a discrete lattice. *Phys. Rev. B* **71**, 094411 (2005).
10. O. Derzhko. Jordan-Wigner fermionization for spin-1/2 systems in two dimensions: A brief review. *J. Phys. Studies* **5**, 49 (2001).
11. E. Lieb, T. Schultz, D. Mattis. Two soluble models of an antiferromagnetic chain. *Ann. Phys. (N.Y.)* **16**, 407 (1961).
12. V.M. Kontorovich, V.M. Tsukernik. Magnetic properties of a spin array with two sublattices. *Soviet Physics JETP* **26**, 687 (1968).
13. T. Krokhnalskii, T. Verkholyak, O. Baran, V. Ohanyan, O. Derzhko. Spin- $\frac{1}{2}$  XX chain in a transverse field with regularly alternating  $g$  factors: Static and dynamic properties. *Phys. Rev. B* **102**, 144403 (2020).
14. O. Derzhko, T. Krokhnalskii. Dynamic structure factor of the spin- $\frac{1}{2}$  transverse Ising chain. *Phys. Rev. B* **56**, 11659 (1997).
15. O. Derzhko, T. Krokhnalskii, J. Stolze. Dynamics of the spin-1/2 isotropic XY chain in a transverse field. *J. Phys. A* **33**, 3063 (2000).
16. J.P. de Lima, L.L. Gonçalves, T.F.A. Alves. Anisotropic XY model on the inhomogeneous periodic chain. *Phys. Rev. B* **75**, 214406 (2007).
17. T. Antal, Z. Rácz, A. Rákos, and G. M. Schütz. Isotropic transverse XY chain with energy and magnetization currents. *Phys. Rev. E* **57**, 5184 (1998).
18. I. Titvinidze, G. Japaridze. Phase diagram of the spin  $S = 1/2$  extended XY model. *Eur. Phys. J. B* **32**, 383 (2003).
19. A.A. Zvyagin. Quantum phase transitions in low-dimensional quantum spin systems with incommensurate magnetic structures. *Phys. Rev. B* **72**, 064419 (2005).
20. P. Lou. Quantum phase transition in a solvable spin model. *Phys. Rev. B* **72**, 064435 (2005).
21. T. Krokhnalskii, O. Derzhko, J. Stolze, T. Verkholyak. Dynamic properties of the spin- $\frac{1}{2}$  XY chain with three-site interactions. *Phys. Rev. B* **77**, 174404 (2008).
22. M. Topilko, T. Krokhnalskii, O. Derzhko, V. Ohanyan. Magnetocaloric effect in spin-1/2 XX chains with three-spin interactions. *Eur. Phys. J. B* **85**, 278 (2012).

23. O. Menchyshyn, V. Ohanyan, T. Verkholyak, T. Krokhnalskii, O. Derzhko. Magnetism-driven ferroelectricity in spin- $\frac{1}{2}$   $XY$  chains. *Phys. Rev. B* **92**, 184427 (2015).
24. О.Р. Баран. Ефект потоку енергії в одновимірній спіні- $\frac{1}{2}$   $XX$  моделі магнетоелектрика. Метод множника Лагранжа. *Укр. Фіз. журн.* **66**, 888 (2021).
25. H. Katsura, N. Nagaosa, A.V. Balatsky. Spin current and magnetoelectric effect in noncollinear magnets. *Phys. Rev. Lett.* **95**, 057205 (2005).
26. M. Brockmann, A. Klümper, V. Ohanyan. Exact description of magnetoelectric effect in the spin- $\frac{1}{2}$   $XXZ$  chain with Dzyaloshinskii-Moriya interaction. *Phys. Rev. B* **87**, 054407 (2013).
27. O. Baran, V. Ohanyan, and T. Verkholyak. Spin-1/2  $XY$  chain magnetoelectric: Effect of zigzag geometry. *Phys. Rev. B* **98**, 064415 (2018).
28. V. Ohanyan. Influence of  $XY$  anisotropy on a magnetoelectric effect in spin-1/2  $XY$  chain in a transverse magnetic field. *Condens. Matter Phys.* **23**, 43704 (2020).
29. V. Eisler, Z. Rácz, F. van Wijland. Magnetization distribution in the transverse Ising chain with energy flux. *Phys. Rev. E* **67**, 056129 (2003).
30. J. Li, S. Lei. Thermodynamic properties of the spin-1/2 ferromagnetic Heisenberg chain with long-range interactions. *Phys. Lett. A* **372**, 4086 (2008).
31. J.-S. Caux, F.H.L. Essler, U. Löw. Dynamical structure factor of the anisotropic Heisenberg chain in a transverse field. *Phys. Rev. B* **68**, 134431 (2003).
32. R. Hagemans, J.-S. Caux, U. Löw. Gapped anisotropic spin chains in a field. *Phys. Rev. B* **71**, 014437 (2005).
33. H.H. Fu, K.L. Yao, Z.L. Liu. Thermodynamic properties of a spin- $\frac{1}{2}$  diamond chain as a model for a molecule-based ferrimagnet and the compound  $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$ . *Phys. Rev. B* **73**, 104454 (2006).
34. T. Verkholyak, J. Strečka, M. Jaščur, J. Richter. Magnetic properties of the quantum spin- $\frac{1}{2}$   $XX$  diamond chain: the Jordan–Wigner approach. *Eur. Phys. J. B* **80**, 433 (2011).
35. Y.R. Wang. Ground state of the two-dimensional antiferromagnetic Heisenberg model studied using an extended Wigner–Jordan transformation. *Phys. Rev. B* **43**, 3786 (1991).
36. E. Fradkin. Jordan–Wigner transformation for quantum-spin systems in two dimensions and fractional statistics. *Phys. Rev. Lett.* **63**, 322 (1989).
37. A. Lopez, A.G. Rojo, E. Fradkin. Chern–Simons theory of the anisotropic quantum Heisenberg antiferromagnet on a square lattice. *Phys. Rev. B* **49**, 15139 (1994).
38. O. Derzhko, T. Verkholyak, R. Schmidt, J. Richter. Square-lattice  $s = 1/2$   $XY$  model and the Jordan–Wigner fermions: the ground-state and thermodynamic properties. *Physica A* **320**, 407 (2003).
39. O. Derzhko, T. Krokhnalskii. Dynamics of  $zz$  spin correlations in the square-lattice spin-1/2 isotropic  $XY$  model. *Physica B* **337**, 357 (2003).
40. O. Derzhko, T. Krokhnalskii. Jordan–Wigner approach to dynamic correlations in 2D spin-1/2 models. *Czech. J. Phys.* **55**, 601 (2005).
41. О.Р. Баран, Т.М. Верхоляк. Основний стан двовимірної спіні- $\frac{1}{2}$   $J_1 - J_2$  моделі Гайзенберга в підході ферміонізації Йордана–Вігнера. *Журнал фізичних досліджень* **19**, 4701 (2015).
42. O.R. Baran, T.M. Verkholyak. Two-dimensional spin-1/2  $J_1 - J'_1 - J_2$  Heisenberg model within Jordan–Wigner transformation. *Ukr. J. Phys.* **61**, 597 (2016).
43. T. Jolicœur, G. Misguich, S.M. Girvin. Magnetization process from Chern–Simons theory and its application to  $\text{SrCu}_2(\text{BO}_3)_2$ . *Progr. Theor. Phys. Suppl.* **145**, 76 (2002).
44. D. Eliezer, G. Semenoff. Anyonization of lattice Chern–Simons theory. *Annals of Physics* **217**, 66 (1992).
45. L. Čanová, J. Strečka, T. Lučivjanský. Exact solution of the mixed spin-1/2 and spin- $S$  Ising–Heisenberg diamond chain. *Condens. Matter Phys.* **12**, 353 (2009).
46. C. Trippe, A. Honecker, A. Klümper, V. Ohanyan. Exact calculation of the magnetocaloric effect in the spin- $\frac{1}{2}$   $XXZ$  chain. *Phys. Rev. B* **81**, 054402 (2010).
47. B. Wolf, A. Honecker, W. Hofstetter, U. Tutsch, M. Lang. Cooling through quantum criticality and many-body effects in condensed matter and cold gases. *Int. J. Mod. Phys. B* **28**, 1430017 (2014).
48. E. Warburg. Magnetische untersuchungen. *Ann. Phys. (Leipzig)* **13**, 141 (1881).
49. W.F. Giauque, D.P. MacDougall. Attainment of temperatures below  $1^\circ$  absolute by demagnetization of  $\text{Gd}_2(\text{SO}_4)_3 \cdot 8\text{H}_2\text{O}$ . *Phys. Rev.* **43**, 768 (1933).
50. A.S. Oja, O.V. Lounasmaa. Nuclear magnetic ordering in simple metals at positive and negative nanokelvin temperatures. *Rev. Mod. Phys.* **69**, 1 (1997).
51. P. Strehlow, H. Nuzha, E. Bork. Construction of a nuclear cooling stage. *J. Low. Temp. Phys.* **147**, 81 (2007).
52. А.А. Звягин. Магнітне упорядочення анізотропних магнетиків внаслідок повороту магнітного поля. *Фізика низьких температур* **43**, 1194 (2017).
53. K.A. Gschneidner Jr., V.K. Pecharsky, A.O. Tsokol. Recent developments in magnetocaloric materials. *Rep. Prog. Phys.* **68**, 1479 (2005).
54. A.M. Tishin, Y.I. Spichkin. *The Magnetocaloric Effect and its Applications* (Institute of Physics, 2003) [ISBN: 9780429141379].
55. S. Sachdev. *Quantum Phase Transitions* (Cambridge University Press, 2011) [ISBN: 9780521514682].
56. B. Wolf, Y. K. Tsui, D. Jaiswal-Nagar, U. Tutsch, A. Honecker, K. Remović-Langer, G. Hofmann, A. Prokofiev, W. Assmus, G. Donath, M. Lang. Magnetocaloric effect and magnetic cooling near a field-induced quantum-critical point. *Proc. Natl. Acad. Sci. U.S.A.* **108**, 6862 (2011).
57. M.E. Zhitomirsky, A. Honecker. Magnetocaloric effect in one-dimensional antiferromagnets. *J. Stat. Mech.: Theor. Exp.* **2004**, P07012 (2004).
58. J. Strečka, O. Rojas, T. Verkholyak, M.L. Lyra. Magnetization process, bipartite entanglement, and enhanced

- magnetocaloric effect of the exactly solved spin-1/2 Ising-Heisenberg tetrahedral chain. *Phys. Rev. E* **89**, 022143 (2014).
59. L. Gálisová, J. Strečka. Magnetic Grüneisen parameter and magnetocaloric properties of a coupled spin–electron double-tetrahedral chain. *Phys. Lett. A* **379**, 2474 (2015).
60. L. Gálisová, J. Strečka. Vigorous thermal excitations in a double-tetrahedral chain of localized Ising spins and mobile electrons mimic a temperature-driven first-order phase transition. *Phys. Rev. E* **91**, 022134 (2015).
61. L. Gálisová. Magnetocaloric effect in the symmetric spin-1/2 diamond chain with different Landé  $g$ -factors of the Ising and Heisenberg spins. *Acta Mechanica Slovaca* **19**, 46 (2015).
62. H.A. Zad, N. Ananikian, M. Jaščur. Single-ion anisotropy effects on the demagnetization process of the alternating weak-rung interacting mixed spin-(1/2, 1) Ising-Heisenberg double saw-tooth ladders. *Physica Scripta* **95**, 095702 (2020).
63. L. Gálisová. Reentrant phenomenon and inverse magnetocaloric effect in a generalized spin-(1/2,  $s$ ) Fisher’s superexchange antiferromagnet. *J. Phys.: Condens. Matter* **28**, 476005 (2016).
64. L. Gálisová, J. Strečka. Magnetic and magnetocaloric properties of the exactly solvable mixed-spin Ising model on a decorated triangular lattice in a magnetic field. *Physica E* **99**, 244 (2018).
65. J. Strečka, K. Karl’ová. Weak singularities of the isothermal entropy change as the smoking gun evidence of phase transitions of mixed-spin Ising model on a decorated square lattice in transverse field. *Entropy* **23**, 1533 (2021).
66. L. Zhu, M. Garst, A. Rosch, Q. Si. Universally Diverging Grüneisen parameter and the magnetocaloric effect close to quantum critical points. *Phys. Rev. Lett.* **91**, 066404 (2003).
67. M. Garst, A. Rosch. Sign change of the Grüneisen parameter and magnetocaloric effect near quantum critical points. *Phys. Rev. B* **72**, 205129 (2005).
68. T. Zajarniuk, A. Szewczyk, P. Wiśniewski, M.U. Gutowska, R. Puzniak, H. Szymczak, I. Gudim, V.A. Bedarev, M.I. Pashchenko, P. Tomczak, W. Szuszkiewicz. Quantum versus classical nature of the low-temperature magnetic phase transition in  $\text{TbAl}_3(\text{BO}_3)_4$ . *Phys. Rev. B* **105**, 094418 (2022).
69. A.P. Moina. Negative/positive electrocaloric effect in antiferroelectric squaric acid. *J. Appl. Phys.* **133**, 094101 (2023).

Одержано 26.04.23

O.R. Baran

MAGNETOCALORIC EFFECT  
IN THE ONE-DIMENSIONAL SPIN- $\frac{1}{2}$  XX MODEL  
WITH TWO PERIODICALLY VARYING  $g$ -FACTORS

The influence of a non-uniformity of the  $g$ -factors with period two on the magnetocaloric effect in the spin- $\frac{1}{2}$  XX chain in the transverse field has been studied. By means of the Jordan–Wigner transformation, the problem is reduced to the Hamiltonian of noninteracting spinless fermions and solved exactly. The variation of isentropes and the field dependences of the magnetic Grüneisen ratio with a change in the ratio  $g_2/g_1$  are analyzed. Main attention is paid to the low-temperature region. Distinctions among the magnetocaloric effect manifestations in the cases where the  $g$ -factors have different or identical signs, or if either of  $g$ -factors equals zero, are demonstrated.

*Keywords:* one-dimensional quantum spin models,  $g$ -factor, Jordan–Wigner fermionization, magnetocaloric effect, quantum phase transition.