

Б.М. ЛІСНИЙ

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

РОМБІЧНОПОДІБНИЙ ЛАНЦЮЖОК ІЗІНГА–ГАББАРДА У СПЕЦІАЛЬНІЙ ГРАНИЦІ НЕСКІНЧЕННОГО ОДНОЦЕНТРОВОГО ВІДШТОВХУВАННЯ

УДК 538.953, 538.955

Точний розв'язок для дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда аналізується в спеціальній границі нескінченного одноцентрового електрон-електронного відштовхування, де двоелектронний димер Габбарда стає еквівалентним антиферомагнітному ізотропному димеру Гайзенберґа. Аналітично розраховано спеціальну границю нескінченного відштовхування для матриці коміркового гамільтоніана цієї моделі і показано, що точний розв'язок для дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда в цій границі збігається з точним розв'язком спін-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберґа з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберґа. Чисельний розрахунок спеціальної границі нескінченного відштовхування для фазової діаграми основного стану і термодинамічних характеристик дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда виконано таким чином, щоб забезпечити дуже швидко збіжність до граничних результатів для цих характеристик.

Ключові слова: ромбічний ланцюжок Ізінга–Габбарда, точний розв'язок, основний стан, термодинамічні характеристики, геометрична фрустрація.

1. Вступ

Інтерес до вивчення основного стану, магнітних і теплових властивостей, а останнім часом і псевдокритичної поведінки спін-1/2 ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберґа [1–16] і спін-електронного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда [17–22] в значній мірі ініційований незвичайними особливостями магнітних і теплових властивостей природного мінералу азуриту $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$, такими як наявність плато на одній третині намагніченості насичення на кривій намагнічування при низькій температурі і наявність двох піків на температурній залежності питомої теплоємності [23–26]. Відомо, що азурит забезпечує експериментальну реалізацію фрустрованого спін-1/2 ромбічного ланцюжка Гайзенберґа [27, 28]. Хоча точно розв'язу-

ваний спін-1/2 ромбічний ланцюжок Ізінга–Гайзенберґа [1, 2, 11] дає лише спрощену версію вищезгаданої моделі, вона якісно відтворює експериментальні особливості намагніченості та теплоємності азуриту: проміжне плато намагнічування на третині намагніченості насичення та подвійний пік температурної залежності питомої теплоємності [23–26]. Тому теоретичне дослідження спін-1/2 ромбічних Ізінга–Гайзенберґа [1–16] і Ізінга–Габбарда [17–22] ланцюжків є корисною сферою діяльності для розуміння механізмів утворення проміжних плато на кривій намагнічування і додаткових максимумів на температурній кривій питомої теплоємності, а також для аналізу впливу геометричної фрустрації і квантових флуктуацій. Ці відносно прості моделі можна також використовувати для вивчення більш складних систем за допомогою багаточастинкової теорії збурень [29, 30].

Фазові діаграми основного стану, криві намагнічування, температурні криві намагніченості, магнітної сприйнятливості і питомої теплоємності спін-1/2 антиферомагнітних дисторсних ромбічних ланцюжків Ізінга–Габбарда [19] і Ізінга–Гайзенберґа [2] дуже схожі між собою. Ця схожість є

Цитування: Лісний Б.М. Ромбічноподібний ланцюжок Ізінга–Габбарда у спеціальній границі нескінченного одноцентрового відштовхування. *Укр. фіз. журн.* **69**, № 10, 736 (2024).

© Видавець ВД “Академперіодика” НАН України, 2024. Стаття опублікована за умовами відкритого доступу за ліцензією CC BY-NC-ND (<https://creativecommons.org/licenses/by-nc-nd/4.0/>).

не випадковою, оскільки модель Габбарда для двох електронів на двовузловому кластері (димер) з дуже сильним одноцентровим електрон-електронним відштовхуванням у другому порядку розкладу за інтегралом перескоків еквівалентна антиферромагнітній ізотропній (XXX) моделі Гайзенберга на спін-1/2 двовузловому кластері [31, 32].

У спеціальній границі нескінченного одноцентрового відштовхування, яка зберігає спеціальне співвідношення між одноцентровим відштовхуванням і інтегралом перескоків, розклад за інтегралом перескоків [31, 32] містить лише другий порядок, а вищі порядки перетворюються на нуль. Отже, двоелектронний димер Габбарда у цій спеціальній границі нескінченного відштовхування еквівалентний антиферромагнітному спін-1/2 XXX димеру Гайзенберга. Поблизу цієї спеціальної границі існує якісний і кількісний взаємозв'язок між квантово-механічними, магнітними і тепловими характеристиками ромбічних ланцюжків Ізінга–Габбарда [19] і Ізінга–Гайзенберга [2] (з антиферромагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга). Дослідження цього взаємозв'язку дозволить передбачити поведінку і обчислити фізичні характеристики моделей Ізінга, декорованих антиферромагнітними димерами Гайзенберга, на основі результатів для фізичних характеристик відповідних моделей, декорованих двоелектронними димерами Габбарда і навпаки.

У статті розглядається спеціальна границя нескінченного електрон-електронного одноцентрового відштовхування, у якій двоелектронний димер Габбарда є еквівалентним антиферромагнітному ізотропному димеру Гайзенберга, для основного стану і точного розв'язку дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда. Ми аналітично продемонструємо, що квантовомеханічні стани і точний розв'язок для дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда у цій спеціальній границі і спін-1/2 ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга з антиферромагнітною XXX взаємодією Гайзенберга є еквівалентними між собою. Ми також отримуємо спеціальну границю нескінченного електрон-електронного відштовхування для фазової діаграми основного стану, магнітної і теплової характеристик дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда у випадку антиферромагнітної взаємодії за допомогою чисельного методу, який забезпечує дуже швидко збіжність до результатів

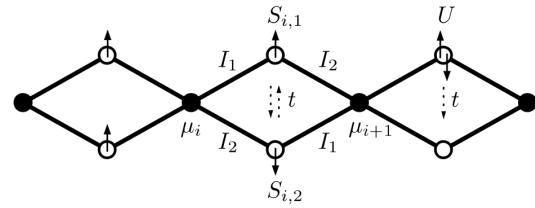


Рис. 1. Схематична діаграма фрагмента дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда. Суцільні і порожні кола позначають вузли, зайняті спінами Ізінга, і міжвузлові позиції, зайняті мобільними електронами, відповідно

спеціальної границі для цих характеристик. Таким чином ми обчислимо фазову діаграму основного стану, магнітні та теплові характеристики спін-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга у випадку антиферромагнітних взаємодій: Ізінга і XXX Гайзенберга.

2. Спеціальна границя нескінченного одноцентрового відштовхування для точного розв'язку моделі

Розглянемо дисторсний ромбічний ланцюжок Ізінга–Габбарда у зовнішньому магнітному полі [19]. Примітивна комірка ланцюжка (рис. 1) містить вузли i і $i+1$, а також міжвузлові положення $(i, 1)$ і $(i, 2)$. Вузли i зайняті спінами Ізінга $\mu_i = \pm 1/2$, які з'єднуються з сусідніми спінами за допомогою взаємодії Ізінга. На міжвузлових положеннях $(i, 1)$ і $(i, 2)$ є два мобільні електрони з одноцентровим відштовхуванням між ними, які перестрибують між цими міжвузловими положеннями відповідно до правила Паулі. Отже, міжвузлові положення $(i, 1)$ і $(i, 2)$ формують димер Габбарда, наполовину заповнений електронами.

Гамільтоніан цього ланцюжка \mathcal{H} є сумою гамільтоніанів комірок \mathcal{H}_i [19]:

$$\begin{aligned} \mathcal{H} &= \sum_{i=1}^N \mathcal{H}_i, \\ \mathcal{H}_i &= \sum_{\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}} t(c_{i,1;\sigma}^\dagger c_{i,2;\sigma} + c_{i,2;\sigma}^\dagger c_{i,1;\sigma}) + \\ &+ \sum_{d=1}^2 U c_{i,d;\uparrow}^\dagger c_{i,d;\uparrow} c_{i,d;\downarrow}^\dagger c_{i,d;\downarrow} + \\ &+ \mu_i (I_1 S_{i,1} + I_2 S_{i,2}) + \mu_{i+1} (I_2 S_{i,1} + I_1 S_{i,2}) - \\ &- \frac{1}{2} h_1 (\mu_i + \mu_{i+1}) - h_2 (S_{i,1} + S_{i,2}), \end{aligned} \quad (1)$$

де N це кількість примітивних комірок у ланцюжку; $c_{i,d;\sigma}^\dagger$ і $c_{i,d;\sigma}$ є операторами народження і знищення для електрона з спіном $\sigma \in \{\uparrow, \downarrow\}$ у міжвузловому положенні (i, d) ; μ_i є z -компонента спін-1/2 оператора на вузлі i , для якого мається на увазі періодична гранична умова $\mu_{N+1} \equiv \mu_1$; $S_{i,d} = (c_{i,d;\uparrow}^\dagger c_{i,d;\uparrow} - c_{i,d;\downarrow}^\dagger c_{i,d;\downarrow})/2$ є z -компонента оператора для сумарного спіна електронів у міжвузловому положенні (i, d) ; параметри t і U позначають інтеграл перескоку і кулонівське одноцентрове відштовхування електронів; I_1 і I_2 – це параметри взаємодії Ізінга для зв'язків вздовж сторін ромба (рис. 1), які є однаковими лише для колінеарних зв'язків; h_1 і h_2 – це магнітні поля, які діють на спіни Ізінга і спіни електронів відповідно. Слід зазначити, що гамільтоніан (1) також відповідає простому ланцюжку Ізінга–Габбарда (вузли і міжвузлові положення розташовані на лінії), в якому спіни Ізінга μ_i з'єднується з першим, I_1 , і другим, I_2 , сусідами.

Статистична сума дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда $\mathcal{Z} = \text{Tr} \exp(-\beta \mathcal{H})$, де $\beta = 1/k_B T$, k_B є константа Больцмана, і T є абсолютною температурою, зводиться до форми [19]

$$\mathcal{Z} = \text{Tr}_{\{\mu\}} \prod_{i=1}^N \text{Tr}_{\{i,1;i,2\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_i),$$

де $\text{Tr}_{\{\mu\}}$ є слід щодо спінів Ізінга, а також $\text{Tr}_{\{i,1;i,2\}}$ є слід щодо станів двох електронів у положеннях $(i, 1)$ і $(i, 2)$. Для того, щоб отримати точний розв'язок і визначити основний стан цієї моделі, необхідно отримати власні значення і власні функції коміркового гамільтоніана \mathcal{H}_i (1). Точний розв'язок і основний стан цієї моделі були отримані раніше в роботі [19]. Тут ми знайдемо матрицю і власні значення коміркового гамільтоніана \mathcal{H}_i в границі $U \rightarrow \infty$ з умовою $4t^2/U = J$, де J є позитивним параметром, тобто у границі $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)|_{4t^2/U=J}$. У цій спеціальній границі $U \rightarrow \infty$, яка зберігає спеціальне співвідношення між одноцентровим відштовхуванням і інтегралом перескоків, двоелектронний димер Габбарда є еквівалентним спін-1/2 антиферромагнітному ХХХ димеру Гайзенберга.

Перейдемо до матричного представлення гамільтоніана \mathcal{H}_i у підпросторі електронів. Для цього ми беремо базис, побудований з станів двох еле-

ктронів у i -тій ромбічній комірці [19]:

$$\begin{aligned} |\uparrow, \uparrow\rangle_i &= c_{i,1;\uparrow}^\dagger c_{i,2;\uparrow}^\dagger |0\rangle, & |\downarrow, \downarrow\rangle_i &= c_{i,1;\downarrow}^\dagger c_{i,2;\downarrow}^\dagger |0\rangle, \\ |\uparrow, \downarrow\rangle_i &= c_{i,1;\uparrow}^\dagger c_{i,2;\downarrow}^\dagger |0\rangle, & |\downarrow, \uparrow\rangle_i &= c_{i,1;\downarrow}^\dagger c_{i,2;\uparrow}^\dagger |0\rangle, \\ |\uparrow\downarrow, 0\rangle_i &= c_{i,1;\uparrow}^\dagger c_{i,1;\downarrow}^\dagger |0\rangle, & |0, \uparrow\downarrow\rangle_i &= c_{i,2;\uparrow}^\dagger c_{i,2;\downarrow}^\dagger |0\rangle. \end{aligned} \quad (2)$$

У цьому базисі гамільтоніан \mathcal{H}_i може бути представлений у наступній матричній формі:

$$\mathbf{H}_i = \epsilon_1 \oplus (-\epsilon_1) \oplus \mathbf{K} - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1})\mathbf{1}, \quad (3)$$

де

$$\epsilon_1 = \frac{I_1 + I_2}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}) - h_2,$$

$$\mathbf{K} = \begin{pmatrix} \epsilon_2 & 0 & t & t \\ 0 & -\epsilon_2 & -t & -t \\ t & -t & U & 0 \\ t & -t & 0 & U \end{pmatrix},$$

$$\epsilon_2 = \frac{I_1 - I_2}{2}(\mu_i - \mu_{i+1}),$$

і $\mathbf{1}$ є одиничною матрицею. Матриця \mathbf{K} є інваріантною щодо перестановки третього і четвертого рядків/стовпців. Ця симетрія дозволяє нам знайти унітарне перетворення

$$\mathbf{P} = \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \right) \oplus \left(\frac{1}{\sqrt{2}} \quad \frac{1}{\sqrt{2}} \right), \quad (4)$$

що зводить матрицю \mathbf{K} до квазі-діагональної форми

$$\mathbf{K}_1 = \mathbf{P}^+ \mathbf{K} \mathbf{P} = \mathbf{L} \oplus U, \quad (5)$$

де

$$\mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_2 & 0 \\ \epsilon_2 & 0 & 2t \\ 0 & 2t & U \end{pmatrix}.$$

Отже, тепер нам потрібно знайти спеціальну границю $U \rightarrow \infty$ для матриці \mathbf{L} . Для цього ми напишемо матрицю \mathbf{L} як суму з двох матриць:

$$\mathbf{L} = \mathbf{L}_0 + \epsilon_2 \begin{pmatrix} 0 & 1 & 0 \\ 1 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 \end{pmatrix},$$

де

$$\mathbf{L}_0 = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 2t \\ 0 & 2t & U \end{pmatrix}.$$

Таким чином, ми відокремили внески від двоелектронного димера Габбарда і від зв'язків Ізінга уздовж сторін ромбічної комірки. Тепер ми зосереджуємось на матриці \mathbf{L}_0 , яка містить параметри t і U , для яких нам потрібно перейти до границі $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)_{|4t^2/U=J}$. Ми знаходимо власні значення матриці \mathbf{L}_0 :

$$l_1 = 0, \quad l_{2,3} = \frac{1}{2} \left(U \mp \sqrt{U^2 + 16t^2} \right),$$

і їх відповідні власні вектори, на основі яких ми отримуємо унітарне перетворення

$$\mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & q_2 & q_3 \\ 0 & -q_3 & q_2 \end{pmatrix}, \quad q_{2,3} = \frac{1}{\sqrt{2}} \sqrt{1 \pm \frac{U}{\sqrt{U^2 + 16t^2}}},$$

яке реалізує перехід до базису, утвореного з власних векторів матриці \mathbf{L}_0 . Тепер ми застосовуємо унітарне перетворення \mathbf{Q} до матриці \mathbf{L} і отримуємо її у наступній формі:

$$\mathbf{L}_1 = \mathbf{Q}^+ \mathbf{L} \mathbf{Q} = \begin{pmatrix} 0 & 0 & 0 \\ 0 & l_2 & 0 \\ 0 & 0 & l_3 \end{pmatrix} + \epsilon_2 \begin{pmatrix} 0 & q_2 & q_3 \\ q_2 & 0 & 0 \\ q_3 & 0 & 0 \end{pmatrix}.$$

Давайте знайдемо матрицю \mathbf{L}_1 у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$. Для цього ми знаходимо власні значення l_2 , l_3 і елементи q_2 і q_3 матриці \mathbf{Q} в границі $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)_{|4t^2/U=J}$:

$$\lim_{U \rightarrow \infty} l_2 = -J, \quad \lim_{U \rightarrow \infty} l_3 = \infty, \quad \lim_{U \rightarrow \infty} q_2 = 1, \quad \lim_{U \rightarrow \infty} q_3 = 0.$$

Використовуючи ці результати, ми отримуємо матриці \mathbf{Q} , \mathbf{L}_1 , і \mathbf{L} у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$:

$$\lim_{U \rightarrow \infty} \mathbf{Q} = \mathbf{1},$$

$$\lim_{U \rightarrow \infty} \mathbf{L}_1 = \lim_{U \rightarrow \infty} \mathbf{L} = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_2 & 0 \\ \epsilon_2 & -J & 0 \\ 0 & 0 & \infty \end{pmatrix}.$$

Тепер ми отримуємо матрицю \mathbf{K}_1 (5) у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$:

$$\mathbf{K}_{1\infty} = \lim_{U \rightarrow \infty} \mathbf{K}_1 = \begin{pmatrix} 0 & \epsilon_2 \\ \epsilon_2 & -J \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} \infty & 0 \\ 0 & \infty \end{pmatrix}.$$

Щоб повернутися до базисних векторів $|\uparrow, \downarrow\rangle_i$ і $|\downarrow, \uparrow\rangle_i$ (див. (2)), ми застосовуємо унітарне перетворення

$$\mathbf{R} = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{2}} & \frac{1}{\sqrt{2}} \\ \frac{1}{\sqrt{2}} & -\frac{1}{\sqrt{2}} \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & 1 \end{pmatrix},$$

що нейтралізує дію першого блоку унітарного перетворення \mathbf{P} (4), для матриці $\mathbf{K}_{1\infty}$. У результаті серії послідовних операцій над матрицею \mathbf{K} (3) – унітарне перетворення \mathbf{P} , перехід до спеціальної границі $U \rightarrow \infty$, і унітарне перетворення \mathbf{R} – ми отримуємо матрицю \mathbf{H}_i (3) коміркового гамільтоніана \mathcal{H}_i у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$

$$\mathbf{H}'_i = \epsilon_1 \oplus (-\epsilon_1) \oplus \begin{pmatrix} \epsilon_2 - \frac{J}{2} & \frac{J}{2} \\ \frac{J}{2} & -\epsilon_2 - \frac{J}{2} \end{pmatrix} \oplus \begin{pmatrix} \infty & 0 \\ 0 & \infty \end{pmatrix} - \frac{\hbar_1}{2} (\mu_i + \mu_{i+1}) \mathbf{1}. \quad (6)$$

Якщо додати константу $(J/4)\mathbf{1}$ до матриці \mathbf{H}'_i і відкинути два одновимірні підпростори з нескінченними власними значеннями, тоді ми отримуємо матрицю коміркового гамільтоніана спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга J [2]. Зауважте, що нескінченно великі енергії гамільтоніана \mathbf{H}'_i не впливають на термодинаміку цієї системи в області скінченних температур, оскільки вони недосяжні для скінченних теплових збуджень. Тому гамільтоніан для дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда в спеціальній границі $U \rightarrow \infty$ є еквівалентний гамільтоніану спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга J [2]. Таким чином, основний стан і термодинамічні характеристики, крім вільної енергії, дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда [19] у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$ збігаються з основним станом і відповідними термодинамічними характеристиками спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга [2] з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга. Вільна енергія даного ланцюжка Ізінга–Габбарда на елементарну комірку менша за відповідну вільну енергію ланцюжка Ізінга–Гайзенберга на відповідну константу $J/4$.

Матриця \mathbf{H}'_i (6) має наступні власні значення:

$$\begin{aligned} \mathcal{E}'_1(\mu_i, \mu_{i+1}) &= \epsilon_1 - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \\ \mathcal{E}'_2(\mu_i, \mu_{i+1}) &= -\epsilon_1 - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \\ \mathcal{E}'_3(\mu_i, \mu_{i+1}) &= -\frac{J}{2} - \sqrt{\frac{J^2}{4} + \epsilon_2^2} - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \\ \mathcal{E}'_4(\mu_i, \mu_{i+1}) &= -\frac{J}{2} + \sqrt{\frac{J^2}{4} + \epsilon_2^2} - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \\ \mathcal{E}'_5(\mu_i, \mu_{i+1}) &= \infty - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}), \\ \mathcal{E}'_6(\mu_i, \mu_{i+1}) &= \infty - \frac{h_1}{2}(\mu_i + \mu_{i+1}). \end{aligned} \quad (7)$$

Значення $\mathcal{E}'_k(\mu_i, \mu_{i+1}) + J/4$, де $k = \overline{1, 4}$, збігаються з відповідними власними значеннями комірковогамільтоніана спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга з антиферромагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга J [2].

3. Чисельне обчислення спеціальної границі $U \rightarrow \infty$ для фазової діаграми основного стану і термодинамічних характеристик

Розглянемо чисельний метод обчислення спеціальної границі $U \rightarrow \infty$ для фазової діаграми основного стану і термодинамічних характеристик, використовуючи для них аналітичні результати роботи [19]. Граничної точки $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)|_{4t^2/U=J}$ можна досягти уздовж кривої $\xi(t, U) = 0$, що задовольняє рівність $\lim_{U \rightarrow \infty} \xi(t, U) = a \lim_{U \rightarrow \infty} t^2/U - b$, де a і b це ненульові позитивні коефіцієнти, які задовольняють відповідне співвідношення $J = 4b/a$. Ми знайшли таку криву, що веде до спеціальної границі $U \rightarrow \infty$, яка виявляє дуже сильний якісний і кількісний зв'язок між фазовими діаграмами основного стану і термодинамічними характеристиками дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда в широких діапазонах значень параметрів t і U і спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга з антиферромагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга J .

Спочатку коротко нагадаємо властивості дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда в основному стані, які детально досліджувалися в роботі [19]. Розглянемо випадок антиферромагнітної взаємодії Ізінга на зв'язках у ромбічній комірці ($I_1 > 0, I_2 \geq 0$). У цьому випадку ланцюжок має

геометричну фрустрацію, оскільки перескок електрона можливий лише при антиферромагнітному впорядкуванні електронних спінів у різних міжвузлових положеннях. Не втрачаючи загальності, беремо $I_1 \geq I_2$ і вводимо параметр $\delta = I_1 - I_2$. Розглянемо випадок, коли магнітні поля h_1 і h_2 є однаковими: $h = h_1 = h_2$. Переходимо до безрозмірних параметрів

$$\tilde{t} = \frac{t}{I_1}, \quad \tilde{U} = \frac{U}{I_1}, \quad \tilde{\delta} = \frac{\delta}{I_1}, \quad \tilde{h} = \frac{h}{I_1}.$$

Параметр $\tilde{\delta} \in [0, 1]$ характеризує ступінь дисторсії ромбічної комірки. У системі безрозмірних параметрів, визначення спеціальної границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ має відповідну форму $(\tilde{t} \rightarrow \infty, \tilde{U} \rightarrow \infty)|_{4\tilde{t}^2/\tilde{U}=\tilde{J}}$, де $\tilde{J} = J/I_1$ є безрозмірним параметром антиферромагнітної взаємодії Гайзенберга.

Модель має чотири основні стани [19]: повністю намагнічений (FM) стан, ферімагнітний (FRI) стан, мономер-димерний (MD) стан і квантовий антиферромагнітний (QAF) стан. Енергії станів на примітивну комірку є такими [19]

$$\begin{aligned} \tilde{\mathcal{E}}_{\text{FM}} &= 1 - \frac{\tilde{\delta}}{2} - \frac{3\tilde{h}}{2}, \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\text{FRI}} &= -1 + \frac{\tilde{\delta}}{2} - \frac{\tilde{h}}{2}, \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\text{MD}} &= \frac{1}{2} \left(\tilde{U} - \sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} \right) - \frac{\tilde{h}}{2}, \\ \tilde{\mathcal{E}}_{\text{QAF}} &= \tilde{\Lambda}_0, \end{aligned}$$

де $\tilde{\Lambda}_0$ є найменшим власним значенням матриці $\tilde{\mathbf{L}} = \mathbf{L}/I_1$. Цим станам відповідають такі хвильові функції [19]:

$$\begin{aligned} |\text{FM}\rangle &= \prod_{i=1}^N |+\rangle_i |\uparrow, \uparrow\rangle_i, \\ |\text{FRI}\rangle &= \prod_{i=1}^N |-\rangle_i |\uparrow, \uparrow\rangle_i, \\ |\text{MD}\rangle &= \prod_{i=1}^N |+\rangle_i [\alpha_1 (|\uparrow, \downarrow\rangle_i - |\downarrow, \uparrow\rangle_i) + \alpha_2 |\psi_i\rangle], \\ |\text{QAF}\rangle &= \prod_{i=1}^N \left| (-)^{n=\{i+1\}} \right\rangle_i \times \\ &\times (A_{(-)^n} |\uparrow, \downarrow\rangle_i - A_{(-)^{n+1}} |\downarrow, \uparrow\rangle_i + B |\psi_i\rangle), \end{aligned}$$

де функції $|\pm\rangle_i$ описують стани спінів μ_i , $|\psi_i\rangle = |\uparrow\downarrow, 0\rangle_i + |0, \uparrow\downarrow\rangle_i$, вираз “ $(-)^n$ ” означає знак числа $(-1)^n$,

$$\alpha_{1,2} = \pm \frac{1}{2} \sqrt{1 \pm \frac{\tilde{U}}{\sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2}}},$$

$$A_{\pm} = \frac{(\tilde{\Lambda}_0 \pm \frac{1}{2}\tilde{\delta}) (\tilde{\Lambda}_0 - \tilde{U})}{\sqrt{2\Phi}}, \quad B = \frac{2\tilde{t}\tilde{\Lambda}_0}{\sqrt{2\Phi}},$$

$$\Phi = \left(\tilde{\Lambda}_0^2 + \frac{1}{4}\tilde{\delta}^2\right) (\tilde{\Lambda}_0 - \tilde{U})^2 + 4\tilde{t}^2\tilde{\Lambda}_0^2.$$

Намагніченість $m = \langle \mu_i + S_{i,1} + S_{i,2} \rangle / 3$ в цих станах має наступні значення: $m = m_{\text{sat}}$ у стані FM, де $m_{\text{sat}} = 1/2$ є намагніченість насичення, $m = m_{\text{sat}}/3$ у станах FRI і MD, $m = 0$ у стані QAF.

За результатами роботи [19], відомо, що топологія фазової діаграми основного стану в площині $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ визначається топологічним параметром (\tilde{T})

$$\tilde{T} = \sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} - \tilde{U}. \quad (8)$$

За відсутності одноцентрового відштовхування ($U = 0$), топологічний параметр \tilde{T} визначається наступним співвідношенням: $\tilde{T} = 4\tilde{t}_0$, де $\tilde{t}_0 = t_0/I_1$, і t_0 є інтегралом перескоку у моделі без одноцентрового відштовхування електронів. Фазова діаграма основного стану в площині $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ має три типи топології [19]. Рис. 2 відображає другий тип топології фазової діаграми основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$, який реалізується за умови $1 < \tilde{T} < 2$ [19]. Области станів FRI і MD на цій фазовій діаграмі розділені сегментом на вертикальній лінії $\tilde{\delta} = \tilde{\delta}_{\text{FM}} \equiv 2 - \tilde{T}$. Нагадаємо, що фазова діаграма основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ з першим типом топології реалізується за умови $\tilde{T} \leq 1$. Виглядає так само як і фрагмент фазової діаграми на рис. 2, який відповідає інтервалу $\tilde{\delta} \in [0, \tilde{\delta}_{\text{FM}}]$ [19]. Третій тип топології фазової діаграми основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ реалізується за відповідної умови $2 \leq \tilde{T}$. Загалом відповідає фрагменту фазової діаграми на рис. 2, який охоплює інтервал $\tilde{\delta} \in [\tilde{\delta}_{\text{FM}}, 1]$, за винятком того, що лінія співіснування основних станів QAF і MD починається в відповідній точці $(0, 0)$ [19].

Залежність топології фазової діаграми основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ від параметрів \tilde{t} і \tilde{U} може бути представлена за допомогою топологічної діаграми (\tilde{t}, \tilde{U}) [19], яка зображена на рис. 3. Еквітопологічна лінія (8), яка починається у відповідній точці

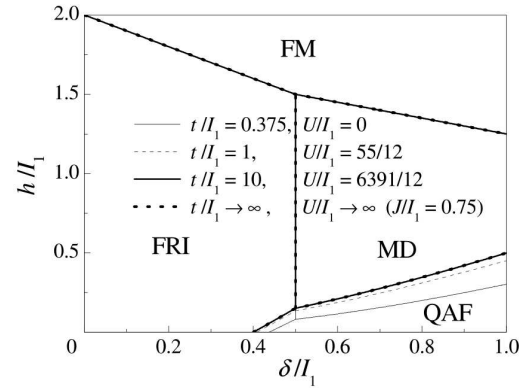


Рис. 2. Фазова діаграма основного стану в $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ площині. Лінії співіснування основних станів відображені для чотирьох наборів значень \tilde{t} і \tilde{U} , які задовольняють умову $\tilde{T} = 1,5$. У випадку $\tilde{U} = 0$, лінії співіснування відображені як в [17], а у випадку $\tilde{U} = 55/12$ вони відображені як у [19]

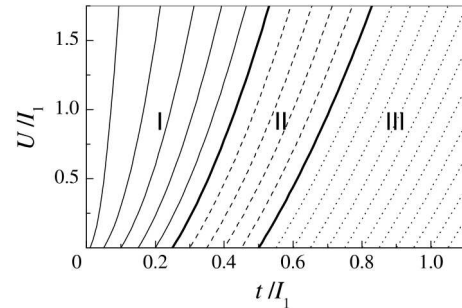


Рис. 3. Топологічна діаграма (\tilde{t}, \tilde{U}) для фазової діаграми основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ [19]: показано еквітопологічні лінії $\tilde{T}(\tilde{t}, \tilde{U}) = \text{const}$. Области трьох топологій, позначені номерами I, II, III, розділені жирними лініями

($\tilde{t} = \tilde{t}_0, \tilde{U} = 0$) і відповідає топологічному параметру $\tilde{T} = 4\tilde{t}_0$, описується рівнянням

$$2\tilde{t}^2 - 2\tilde{t}_0^2 - \tilde{t}_0\tilde{U} = 0.$$

З цього рівняння ми виявляємо, що еквітопологічна лінія в границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ задовольняє відповідне відношення $\lim_{\tilde{U} \rightarrow \infty} 4\tilde{t}^2/\tilde{U} = 2\tilde{t}_0$. Це означає, що гранична точка ($\tilde{t} \rightarrow \infty, \tilde{U} \rightarrow \infty$) на еквітопологічній лінії є точкою спеціальної границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$, і має місце рівність $\tilde{J} = 2\tilde{t}_0 = \tilde{T}/2$, яка пов'язує параметр антиферромагнітної взаємодії Гайзенберга із інтегралом перескоку у моделі без одноцентрового відштовхування і з топологічним параметром. Отже, еквітопологічна лінія починається у точці $(\tilde{t} = \tilde{t}_0, \tilde{U} = 0)$, що відповідає моделі без одноцентрового електронного від-

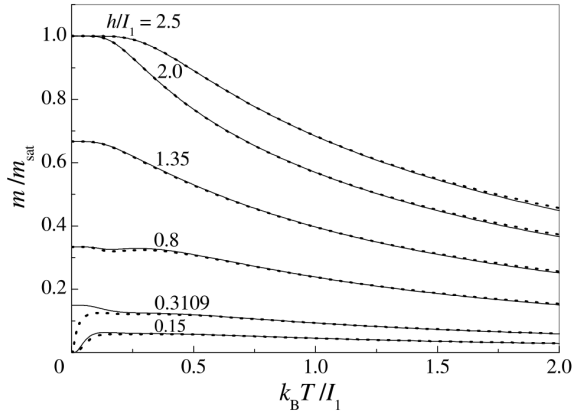


Рис. 4. Намагніченість як функція температури у випадку $\tilde{\delta} = 0,8$ для двох точок (\tilde{t}, \tilde{U}) і кількох вибраних значень магнітного поля. Результати для $\tilde{t} = 1$ і $\tilde{U} = 55/12$ зображені суцільними лініями, а результати для спеціальної границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ ($\tilde{J} = 0,75$) відображені пунктирними лініями

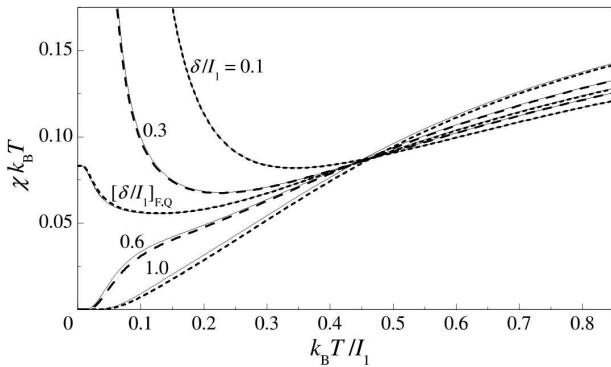


Рис. 5. Сприйнятливість при нульовому магнітному полі помножена на температуру як функція температури для двох точок (\tilde{t}, \tilde{U}) і кількох вибраних значень $\tilde{\delta}$. Результати для $\tilde{t} = 1$ і $\tilde{U} = 55/12$ зображені суцільними лініями, а результати для спеціальної границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ ($\tilde{J} = 0,75$) зображені пунктирними лініями

шттовхування, і закінчується в точці нескінченності ($\tilde{t} \rightarrow \infty, \tilde{U} \rightarrow \infty$), в якій двоелектронний димер Габбарда еквівалентний антиферромагнітному ізотропному димеру Гайзенберга з параметром взаємодії $\tilde{J} = 2\tilde{t}_0 = \tilde{T}/2$.

Енергії станів FM, FRI та MD не змінюються уздовж еквітопологічної лінії (8). Тому фазова діаграма основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$ змінюється найменше (див. рис. 2) при зміні \tilde{t} і \tilde{U} уздовж еквітопологічної лінії. На рис. 2 ми можемо бачити, що зі зростанням \tilde{U} уздовж еквітопологічної лінії область основного стану QAF розширюється, у той час

як значення переміщень ліній співіснування станів, що обмежують область основного стану QAF, швидко зменшується. Зокрема, переміщення цих ліній через зміну \tilde{U} від 5 до 533 приблизно у три рази менші, ніж відповідні переміщення через зміну \tilde{U} від 0 до 5. Лінії співіснування станів для $\tilde{U} = 533$ і для границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ при $\tilde{J} = 0,75$ практично збігаються між собою. Зауважимо, що фазова діаграма основного стану в спеціальній границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ була розрахована за допомогою енергетичного спектру (7). Крива намагнічування для нульової температури визначається з фазової діаграми основного стану $(\tilde{\delta}, \tilde{h})$. Тому зміна цієї кривої намагнічування, яка відбувається уздовж еквітопологічної лінії, безпосередньо пов'язана з вищезазначеними змінами фазової діаграми, відображеної на рис. 2.

Тепер ми порівнюємо між собою термодинамічні характеристики для двох точок на еквітопологічній лінії $\tilde{T} = 1,5$: перша точка $(\tilde{t} = 1, \tilde{U} = 55/12 \approx 4,6)$ і друга точка $(\tilde{t} = 10^3, \tilde{U} = 63999991/12 \approx 5333333)$, що відповідає математичній спеціальній границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ при $\tilde{J} = 0,75$. Температурна залежність намагніченості m для цих двох точок (\tilde{t}, \tilde{U}) представлена на рис. 4. Ми бачимо, що температурні криві намагніченості для $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{U} \rightarrow \infty$ практично збігаються між собою в області низьких та середніх температур для всіх вибраних значень магнітного поля, за винятком значення $\tilde{h} = 0,3109$. Значна різниця в температурних кривих намагніченості при $\tilde{h} = 0,3109$ поблизу нульової температури викликана тим, що для $\tilde{U} = 55/12$ значення $\tilde{h} = 0,3109$ належить до лінії співіснування станів QAF і FRI, а для спеціальної границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ воно належить до області основного стану QAF (рис. 2). У області високих температур криві намагніченості для $\tilde{U} \rightarrow \infty$ лежать дещо вище, ніж для $\tilde{U} = 55/12$.

На рис. 5 ми можемо побачити незначну кількісну різницю між температурними кривими магнітної сприйнятливості у нульовому полі $\chi = \frac{dm}{dh}$ для $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{U} \rightarrow \infty$, які представлені для декількох значень параметра $\tilde{\delta}$. Зауважте, що температурні криві $\chi k_B T$ на рис. 5 для $\tilde{\delta} = \tilde{\delta}_{F,Q}$, де $\tilde{\delta}_{F,Q}$ – це точка співіснування станів FRI та QAF при нульовому полі (рис. 2), що є функцією \tilde{t} і \tilde{U} , відповідають різним значенням $\tilde{\delta}$, тому що $\tilde{\delta}_{F,Q} = 0,40815$ для $\tilde{U} = 55/12$, але $\tilde{\delta}_{F,Q} = 0,40$ для границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$.

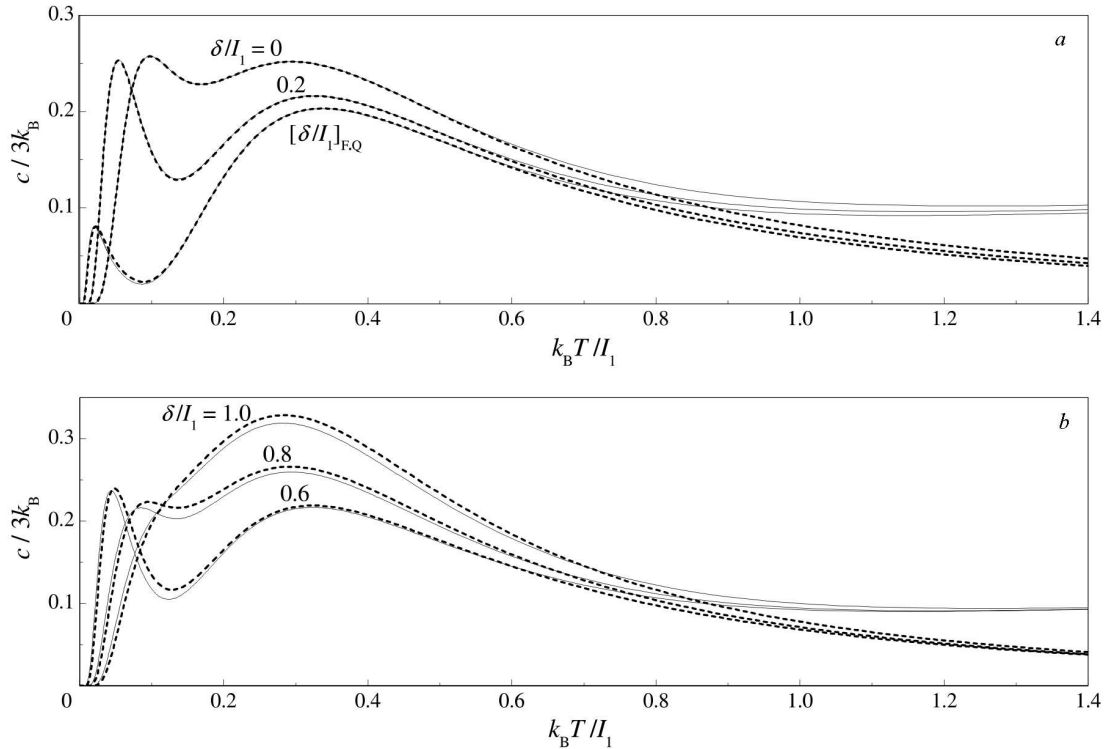


Рис. 6. Питоме теплоємність при нульовому полі як функція температури для двох точок (\tilde{t}, \tilde{U}) і кількох вибраних значень $\tilde{\delta}$: на інтервалі $\tilde{\delta} \in [0, \tilde{\delta}_{\text{F,Q}}]$ (а), що відповідає основному стану FRI, і на інтервалі $\tilde{\delta} \in (\tilde{\delta}_{\text{F,Q}}, 1]$ (б), що відповідає основному стану QAF. Результати для $\tilde{t} = 1$ і $\tilde{U} = 55/12$ представлені суцільними лініями, а результати для спеціальної границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ ($J = 0,75$) подані пунктирними лініями

Питоме теплоємність $c = -T \frac{\partial^2 f}{\partial T^2}$, де f є вільною енергією на примітивну комірку в термодинамічній границі [19], в залежності від температури при нульовому полі показана на рис. 6. Як відомо з [19], температурні криві питомої теплоємності у нульовому полі для $\tilde{t} = 1$, $\tilde{U} = 55/12$ і $\tilde{\delta} \in [0, 1]$ мають дуже широкий максимум у високотемпературній області, його початкову частину можна побачити на рис. 6. Температура цього максимуму питомої теплоємності пропорційна одноцентровому відштовхуванню. У спеціальній границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ питоме теплоємність не має цього максимуму [2]. Тому цей максимум питомої теплоємності відповідає інтенсивному збільшенню/зменшенню реалізації станів

$$\prod_{i=1}^N |\pm\rangle_i \frac{1}{\sqrt{2}} (|\uparrow\downarrow, 0\rangle_i - |0, \uparrow\downarrow\rangle_i),$$

енергія яких в нульовому полі дорівнює \tilde{U} , а у спеціальній границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ відповідає $\mathcal{E}'_6(\mu_i, \mu_{i+1})$ (7),

а також станів з високою ймовірністю перебування двох електронів на одній позиції, енергія яких в нульовому полі дещо відрізняється від \tilde{U} , до того ж, у спеціальній границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$, вона відповідає $\mathcal{E}'_5(\mu_i, \mu_{i+1})$ (7). У області низьких і середніх температур конкретні криві теплоємності для $\tilde{U} = 55/12$ і у границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ практично збігаються між собою для $\tilde{\delta} \leq \tilde{\delta}_{\text{F,Q}}$ (рис. 6, а), і дуже близькі між собою для $\tilde{\delta} > \tilde{\delta}_{\text{F,Q}}$ (рис. 6, б). Ще раз зазначимо, що цей параметр $\tilde{\delta}_{\text{F,Q}}$ має різні значення для $\tilde{U} = 55/12$ і в границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$.

Ми також обчислили намагніченість, магнітну сприйнятливість і питому теплоємність як функції температури в нульовому полі для точки $\tilde{t} = 10$ та $\tilde{U} = 6391/12$ на еквітопологічній лінії $\tilde{T} = 1.5$. Температурні криві намагніченості і магнітної сприйнятливості для $\tilde{U} = 6391/12$ практично збігається з відповідними кривими у границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$, а температурні криві питомої теплоємності для $\tilde{U} = 6391/12$ відрізняються від відповідних

кривих у границі $\tilde{U} \rightarrow \infty$ лише дуже широким максимумом (він починається з $k_B T/I_1 \approx 36$) у високотемпературній області.

4. Висновки

Квантово-механічні і термодинамічні властивості дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда розглядаються в границі $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)|_{4t^2/U=J}$ за допомогою аналітичних і числових підходів. Спеціальна границя $U \rightarrow \infty$ для матриці коміркового гамільтоніана цього ланцюжка аналітично отримується шляхом відокремлення внеску від двоелектронного димеру Габбарда і застосування унітарних перетворень. Як результат, продемонстровано, що матриця коміркового гамільтоніана дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда [19] у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$ після додавання константи $(J/4)$ і відкидання підпростору двох нескінченних енергій дорівнює матриці коміркового гамільтоніана спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга [2] з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга J . Це означає, що аналітичні результати для квантових станів і термодинамічних характеристик дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда [19] у спеціальній границі $U \rightarrow \infty$ відповідають спінів-1/2 дисторсному ромбічному ланцюжку Ізінга–Гайзенберга [2] у випадку антиферомагнітної ізотропної взаємодії Гайзенберга J .

Спеціальна границя $U \rightarrow \infty$ для фазової діаграми основного стану в площині (параметр дисторсії, магнітне поле) і термодинамічних характеристик дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда [19] чисельно обчислюється у випадку антиферомагнітної ізінгової взаємодії, в якому ця модель має геометричну фрустрацію. Ми показали, що еквітопологічна лінія $\sqrt{U^2 + 16t^2} - U = 2J$ для фазової діаграми основного стану закінчується граничною точкою $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)|_{4t^2/U=J}$. Тому на еквітопологічній лінії існує дуже сильний якісний і кількісний зв'язок між числовими результатами для фазової діаграми основного стану і для термодинамічних характеристик цієї моделі Ізінга–Габбарда [19] і числовими результатами для фазової діаграми основного стану і для термодинамічних характеристик відповідної моделі Ізінга–Гайзенберга [2] з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга. Це підтверджує аналіз які-

сного та кількісного зв'язку між числовими результатами для фазової діаграми основного стану і для теплових і магнітних характеристик у двох точках еквітопологічної лінії: точки поблизу початку еквітопологічної лінії і точки, що відповідає математичній границі $(t \rightarrow \infty, U \rightarrow \infty)|_{4t^2/U=J}$. Отже, взаємозв'язок між параметрами взаємодії Габбарда і параметром антиферомагнітної взаємодії Гайзенберга, заданий рівнянням еквітопологічної лінії, дає можливість на основі результатів для фазової діаграми основного стану і термодинамічних характеристик спінів-1/2 дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Гайзенберга з антиферомагнітною ізотропною взаємодією Гайзенберга передбачати якісну і кількісну поведінку характеристик дисторсного ромбічного ланцюжка Ізінга–Габбарда.

Варто зауважити, що отримані результати також дійсні для простих ланцюжків Ізінга–Габбарда (ізінгові спіни і двоелектронні димери розташовані на лінії), у яких ізінговий спін з'єднується з першим (I_1) і другим (I_2) сусідами.

Автор вдячний Т.Верхоляку за обговорення і корисні зауваження.

1. L. Čanová, J. Strečka, M. Jaščur. Geometric frustration in the class of exactly solvable Ising–Heisenberg diamond chains. *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 4967 (2006).
2. B.M. Lisnii. Spin-1/2 asymmetric diamond Ising–Heisenberg chain. *Ukr. J. Phys.* **56**, 1237 (2011).
3. N.S. Ananikian, L.N. Ananikyan, L.A. Chakhmakhchyan, O. Rojas. Thermal entanglement of a spin-1/2 Ising–Heisenberg model on a symmetrical diamond chain. *J. Phys.: Condens. Matter* **24**, 256001 (2012).
4. O. Rojas, M. Rojas, N.S. Ananikian, S.M. de Souza. Thermal entanglement in an exactly solvable Ising–XXZ diamond chain structure. *Phys. Rev. A* **86**, 042330 (2012).
5. N. Ananikian, V. Hovhannisyann. Magnetic properties, Lyapunov exponent and superstability of the spin-1/2 Ising–Heisenberg model on a diamond chain. *Physica A* **392**, 2375 (2013).
6. L. Gálisová. Magnetic properties of the spin-1/2 Ising–Heisenberg diamond chain with the four-spin interaction. *Phys. Status Solidi B* **250**, 187 (2013).
7. S. Bellucci, V. Ohanyan. Correlation functions in one-dimensional spin lattices with Ising and Heisenberg bonds. *Eur. Phys. J. B* **86**, 446 (2013).
8. J. Torrico, M. Rojas, S.M. de Souza, O. Rojas, N.S. Ananikian. Pairwise thermal entanglement in the Ising–XYZ diamond chain structure in an external magnetic field. *EPL* **108**, 50007 (2014).

9. L. Gálisová. Magnetocaloric effect in the spin-1/2 Ising–Heisenberg diamond chain with the four-spin interaction. *Condens. Matter Phys.* **17**, 13001 (2014).
10. N.S. Ananikian, V.V. Hovhannisyanyan, R. Kenna. Partition function zeros of the antiferromagnetic spin- $\frac{1}{2}$ Ising–Heisenberg model on a diamond chain. *Physica A* **396**, 51 (2014).
11. B. Lisnyi, J. Strečka. Exact results for a generalized spin-1/2 Ising–Heisenberg diamond chain with the second-neighbor interaction between nodal spins. *Phys. Status Solidi B* **251**, 1083 (2014).
12. V. Ohanyan, O. Rojas, J. Strečka, S. Bellucci. Absence of actual plateaus in zero-temperature magnetization curves of quantum spin clusters and chains. *Phys. Rev. B* **92**, 214423 (2015).
13. J. Torrico, M. Rojas, S.M. de Souza, O. Rojas. Zero temperature non-plateau magnetization and magnetocaloric effect in Ising–XYZ diamond chain structure. *Phys. Lett. A* **380**, 3655 (2016).
14. S.M. de Souza, O. Rojas. Quasi-phases and pseudo-transitions in one-dimensional models with nearest neighbor interactions. *Solid State Commun.* **269**, 131 (2017).
15. I.M. Carvalho, J. Torrico, S.M. de Souza, O. Rojas, O. Derzhko. Correlation functions for a spin- $\frac{1}{2}$ Ising–XYZ diamond chain: Further evidence for quasi-phases and pseudo-transitions. *Ann. Physics* **402**, 45 (2019).
16. T. Krokhmal'skii, T. Hutak, O. Rojas, S.M. de Souza, O. Derzhko. Towards low-temperature peculiarities of thermodynamic quantities for decorated spin chains. *Physica A* **573**, 125986 (2021).
17. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra. Magnetization plateau in diamond chains with delocalized interstitial spins. *Phys. Rev. B* **77**, 024402 (2008).
18. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, M.L. Lyra. Magnetocaloric effect in kinetically frustrated diamond chains. *Phys. Rev. B* **79**, 054427 (2009).
19. B.M. Lisnii. Distorted diamond Ising–Hubbard chain. *Low Temp. Phys.* **37**, 296 (2011).
20. B.M. Lisnyi. Asymmetric diamond Ising–Hubbard chain with attraction. *Ukr. J. Phys.* **58**, 195 (2013).
21. M. Nalbandyan, H. Lazaryan, O. Rojas, S.M. de Souza, N. Ananikian. Magnetic, thermal, and entanglement properties of a distorted Ising–Hubbard diamond chain. *J. Phys. Soc. Jpn.* **83**, 074001 (2014).
22. J. Torrico, M. Rojas, M.S.S. Pereira, J. Strečka, M.L. Lyra. Spin frustration and fermionic entanglement in an exactly solved hybrid diamond chain with localized Ising spins and mobile electrons. *Phys. Rev. B* **93**, 014428 (2016).
23. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Kuwai. Experimental evidence of the one-third magnetization plateau in the diamond chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. *J. Magn. Magn. Mater.* **272–276**, 900 (2004).
24. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, H. Ohta. Experimental observation of the 1/3 magnetization plateau in the diamond-chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. *Phys. Rev. Lett.* **94**, 227201 (2005).
25. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, K. Kin-do, A. Matsuo, W. Higemoto, K. Nishiyama, M. Horvatić, C. Berthier. Magnetic properties of the diamond chain compound $\text{Cu}_3(\text{CO}_3)_2(\text{OH})_2$. *Prog. Theor. Phys. Suppl.* **159**, 1 (2005).
26. K.C. Rule, A.U.B. Wolter, S. Süllow, D.A. Tennant, A. Brühl, S. Köhler, B. Wolf, M. Lang, J. Schreuer. Nature of the spin dynamics and 1/3 magnetization plateau in azurite. *Phys. Rev. Lett.* **100**, 117202 (2008).
27. H. Jeschke, I. Opahle, H. Kandpal, R. Valenti, H. Das, T. Saha-Dasgupta, O. Janson, H. Rosner, A. Brühl, B. Wolf, M. Lang, J. Richter, S. Hu, X. Wang, R. Peters *et al.* Multistep approach to microscopic models for frustrated quantum magnets: the case of the natural mineral azurite. *Phys. Rev. Lett.* **106**, 217201 (2011).
28. A. Honecker, S. Hu, R. Peters, J. Richter. Dynamic and thermodynamic properties of the generalized diamond chain model for azurite. *J. Phys.: Condens. Matter* **23**, 164211 (2011).
29. O. Derzhko, O. Krupnitska, B. Lisnyi, J. Strečka. Effective low-energy description of almost Ising–Heisenberg diamond chain. *EPL* **112**, 37002 (2015).
30. T. Verkholyak, J. Strečka. Modified strong-coupling treatment of a spin- $\frac{1}{2}$ Heisenberg trimerized chain developed from the exactly solved Ising–Heisenberg diamond chain. *Phys. Rev. B* **103**, 184415 (2021).
31. M. Takahashi. Half-filled Hubbard model at low temperature. *J. Phys. C* **10**, 1289 (1977).
32. A.H. MacDonald, S.M. Girvin, D. Yoshioka. $\frac{t}{U}$ expansion for the Hubbard model. *Phys. Rev. B* **37**, 9753 (1988).

Одержано 21.05.24.

Переклад на українську мову Ю.А. Куца

D.M. Lisnyi

DISTORTED DIAMOND ISING–HUBBARD CHAIN IN THE SPECIAL LIMIT OF INFINITE ON-SITE REPULSION

The exact solution of the distorted diamond Ising–Hubbard chain is analyzed in the special limit of infinite on-site electron-electron repulsion, where the two-electron Hubbard dimer becomes equivalent to the antiferromagnetic isotropic Heisenberg dimer. The special limit of infinite repulsion for the matrix of the cell Hamiltonian of this model is analytically calculated, and it is demonstrated that the exact solution of the distorted diamond Ising–Hubbard chain in this limit coincides with the exact solution of the spin-1/2 distorted diamond Ising–Heisenberg chain with antiferromagnetic isotropic Heisenberg interaction. The numerical calculation of the special limit of infinite repulsion for the ground-state phase diagram and thermodynamic characteristics of the distorted diamond Ising–Hubbard chain was performed in a way that provides a very fast convergence to the limit results for these characteristics.

Keywords: Ising–Hubbard diamond chain, exact solution, ground state, thermodynamic characteristics, geometric frustration.