Физика низких температур, 2011, т. 37, № 4, с. 380–391

Искаженная ромбическая цепочка Изинга–Хаббарда

Б.М. Лисный

Институт физики конденсированных систем НАН Украины, ул. Свенцицкого, 1, г. Львов, 79011, Украина
E-mail: lisnyj@icmp.lviv.ua

Статья поступила в редакцию 26 мая 2010 г., после переработки 16 августа 2010 г.

Исследовано основное состояние и термодинамика искаженной ромбической цепочки Изинга–Хаббарда с учетом одноцентрового кулоновского отталкивания. Методом декорационно-итерационного преобразования получены точные результаты для свободной энергии, энтропии, теплоемкости, намагниченностей изинговской и хаббардовской подсистем, магнитной восприимчивости. В случае геометрически фрустрированной системы изучено влияние кулоновского отталкивания на основное состояние, полевую и температурную зависимости намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости. Сильное отталкивание предопределяет образование дополнительного высокотемпературного максимума теплоемкости. Независимо от наличия отталкивания температурная зависимость теплоемкости может иметь два низкотемпературных максимума.

Досліджено основний стан і термодинаміку спотвореного ромбічного ланцюжка Ізінга–Хаббарда з врахуванням одноцентрового кулонівського відштовхування. Методом декораційно-ітераційного перетворення отримано точні результати для вільної енергії, ентропії, теплоємності, намагніченостей ізінгівської і хаббардівської підсистем, магнітної сприйнятливості. У випадку геометрично фрустрованої системи вивчено вплив кулонівського відштовхування на основний стан, польову і температурну залежності намагніченості, магнітної сприйнятливості, теплоємності. Сильне відштовхування зумовлює утворення додаткового високотемпературного максимума теплоємності. Незалежно від наявності відштовхування температурна залежність теплоємності може мати два низькотемпературні максимуми.

PACS: 75.10.Pq Спиновые цепочечные модели;
75.40.Cx Статические свойства;
75.50.Gg Ферримагнетики;
75.10.Jm Квантовые спиновые модели, включая квантовую спиновую фрустрацию.

Ключевые слова: спин-электронная цепочка, точно решаемая модель, геометрическая фрустрация, основное состояние, плато намагничивания, теплоемкость.

1. Введение

В статистической механике интерес к одномерным моделям с регулярным изменением взаимодействия между спинами или/и величины спина вызван возможностью их точного решения и применения к объяснению физических свойств сложных реальных систем. На сегодня известно много таких точно решаемых одномерных моделей с определенным типом структуры, создание которой отвечает декорированию примитивной ячейки спин-1/2 цепочки Изинга группой спинов в междоузельные позиции. Декорационные спины могут быть связаны между собой разными взаимодействиями, но с узловыми (изинговскими) спинами они связываются только взаимодействием Изинга. Для точного решения таких моделей используется декорационно-итерационное преобразование [1,2]. Примерами моделей этого типа являются такие цепочки Изинга: спин-(1/2, $S > 1/2$) [3], ферромагнитная–ферромагнитная–антиферромагнитная [4], ромбическая [5]; цепочки Изинга–Гейзенберга, где между декорационными спинами действует взаимодействие Гейзенберга: простая [6,7], ромбическая [8,9], пилообразная [10], тетраэдрическая [11], с треугольными гейзенберговскими плакетками [12]. Эти модели позволяют изучать интересные особенности физических характеристик и эффекты: плато намагничивания на промежуточных значениях намагниченности [4–10,12], дополнительные низкотемпературные максимумы теплоемкости [3, 5–9,12], эффект геометрической фрустрации системы [5,8–12], взаимодействие между геометрической фрустрацией и квантовыми флуктуациями [8–12]. Интерес к этим особенностям и эффектам усиливает то, что они наблюдаются в реальных системах [8,13,14].

Недавно в работе [15] предложена модель, которая представляет собой декорированную мобильными электронами спин-1/2 цепочку Изинга. Это искаженная ромбическая цепочка Изинга–Хаббарда без учета одноцентрового кулоновского отталкивания электронов. В этой цепочке два мобильных электрона осуществляют квантовые перескоки между двумя междоузельными позициями, которые находятся в противоположных вершинах ромба. Спины в узлах и спины электронов связаны между собой вдоль сторон ромба взаимодействиями Изинга. Квантовые перескоки электронов предопределяют антиферромагнитную корреляцию между их спинами [15]. Поэтому при антиферромагнитном взаимодействии Изинга данная цепочка представляет собой геометрически фрустрированную спиновую систему, аналогично ромбической цепочке Изинга–Гейзенберга [8,9]. Цепочка Изинга–Хаббарда точно решается методом декорационно-итерационного преобразования [1,2]. Заметим, что если бы это была искаженная ромбическая цепочка Хаббарда, то ее точное решение можно было бы получить значительно более сложной процедурой лишь при определенных условиях для модельных параметров и для очень низких температур [16]. Для искаженной ромбической цепочки Изинга–Хаббарда без учета одноцентрового кулоновского отталкивания были исследованы свойства основного состояния, процессы намагничивания, температурные зависимости намагниченности, магнитной восприимчивости, теплоемкости [15], а также магнитокалорический эффект [17]. В частности, показано, что в процессе намагничивания при нуле температуры намагниченность может иметь промежуточное плато на высоте 1/3 от намагниченности насыщения, и что температурная кривая теплоемкости имеет главный и низкотемпературный второстепенный максимумы [15].

В настоящей работе исследуются свойства искаженной ромбической цепочки Изинга–Хаббарда [15] с учетом одноцентрового кулоновского отталкивания электронов. Методом декорационно-итерационного преобразования проводится точный расчет термодинамических характеристик. В случае антиферромагнитного взаимодействия Изинга, когда система геометрически фрустрированная, изучается влияние отталкивания на основное состояние, процессы намагничивания, температурные зависимости намагниченности системы, намагниченности изинговской и электронной подсистем, магнитной восприимчивости и теплоемкости.

2. Гамильтониан модели. Точный расчет термодинамических характеристик

Рассмотрим искаженную ромбическую цепочку Изинга–Хаббарда в магнитном поле [15]. Примитивная ячейка цепочки (рис. 1) определяется узлами k и $k+1$, которые занимают изинговские спины. Она содержит две междоузельные позиции $(k,1)$ и $(k,2)$, между которыми осуществляют квантовые перескоки два мобильных электрона. Между двумя электронами на одной позиции действует кулоновское отталкивание. Гамильтониан цепочки $\mathcal{H}$, состоящей из N примитивных ячеек, представляется в виде суммы ячеечных гамильтонианов $\mathcal{H}_k$:

$$\mathcal{H} = \sum_{k=1}^{N} \mathcal{H}_k,$$

$$\mathcal{H}_k = \sum_{\sigma\in\{\uparrow,\downarrow\}} t(c^{\dagger}_{k,1;\sigma}c_{k,2;\sigma} + c^{\dagger}_{k,2;\sigma}c_{k,1;\sigma}) + \sum_{i=1}^{2} U n_{k,i;\uparrow} n_{k,i;\downarrow} +$$

$$+ \mu_k (I_1 S_{k,1} + I_2 S_{k,2}) + \mu_{k+1}(I_2 S_{k,1} + I_1 S_{k,2}) -$$

$$- \frac{1}{2} h_i (\mu_k + \mu_{k+1}) - h_e (S_{k,1} + S_{k,2}), \qquad (1)$$

где $c^{\dagger}_{k,i;\sigma}$ и $c_{k,i;\sigma}$ — операторы рождения и уничтожения электрона со спином $\sigma \in \{\uparrow,\downarrow\}$ на междоузельной позиции (k,i), $i = 1, 2$; $n_{k,i;\sigma} = c^{\dagger}_{k,i;\sigma} c_{k,i;\sigma}$ — оператор числа электронов со спином σ на позиции (k,i); $S_{k,i} = (n_{k,i;\uparrow} - n_{k,i;\downarrow})/2$ — z-компонента оператора суммарного спина электронов на позиции (k,i). Параметры t и U означают интеграл перескока и одноцентровое кулоновское отталкивание электронов. Спиновая переменная μ_k означает z-компоненту спин-1/2 оператора и описывает состояние изинговского спина на узле k. Параметры I_1 и I_2 описывают изинговские взаимодействия вдоль сторон ромба между узловыми и междоузельными спинами примитивной ячейки, как это схематически показано на рис. 1. Параметры h_i и h_e описывают влияние магнитного поля на изинговские и электронные спины соответственно.

Найдем статистическую сумму этой системы $\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}\exp(-\beta\mathcal{H})$, где $\beta = 1/k_B T$, k_B — постоянная Больцмана и T — абсолютная температура. Гамильтонианы $\mathcal{H}_k$ коммутируют между собой, поэтому

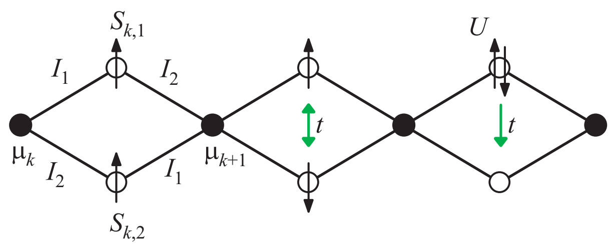


Рис. 1. Схематическое изображение фрагмента искаженной ромбической цепочки Изинга–Хаббарда. Обозначено узловые спины μ_k, μ_{k+1} и созданные двумя мобильными электронами на междоузельных позициях z-компоненты $S_{k,1}$, $S_{k,2}$ суммарных спинов.

$\mathcal{Z}$ можно частично факторизовать:

$$\mathcal{Z} = \mathrm{Tr}_{\{\mu\}} \prod_{k=1}^{N} \mathrm{Tr}_{\{k,1;k,2\}} \exp(-\beta \mathcal{H}_k), \qquad (2)$$

где $\mathrm{Tr}_{\{\mu\}}$ — след по состояниям изинговских спинов, а $\mathrm{Tr}_{\{k,1;k,2\}}$ — след по состояниям двух электронов ячейки k.

Рассчитаем след оператора $\exp(-\beta\mathcal{H}_k)$ по электронным состояниям:

$$\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1}) = \mathrm{Tr}_{\{k,1;k,2\}} \exp(-\beta\mathcal{H}_k).$$

Для этого переходим к матричному представлению операторов $c^{\dagger}_{k,i;\sigma}$ и $c_{k,i;\sigma}$ в базисе, построенном из состояний двух электронов примитивной ячейки:

$$|\uparrow,\uparrow\rangle = c^{\dagger}_{k,1;\uparrow} c^{\dagger}_{k,2;\uparrow} |0\rangle, \quad |\downarrow,\downarrow\rangle = c^{\dagger}_{k,1;\downarrow} c^{\dagger}_{k,2;\downarrow} |0\rangle, \quad |\uparrow,\downarrow\rangle = c^{\dagger}_{k,1;\uparrow} c^{\dagger}_{k,2;\downarrow} |0\rangle,$$

$$|\downarrow,\uparrow\rangle = -c^{\dagger}_{k,1;\downarrow} c^{\dagger}_{k,2;\uparrow} |0\rangle, \quad |\uparrow\downarrow,0\rangle = c^{\dagger}_{k,1;\uparrow} c^{\dagger}_{k,1;\downarrow} |0\rangle, \quad |0,\uparrow\downarrow\rangle = c^{\dagger}_{k,2;\uparrow} c^{\dagger}_{k,2;\downarrow} |0\rangle,$$

где состояния обозначены так же, как в работе [15]. В результате получаем

$$\mathcal{H}_k = h_{11} \oplus (-h_{11}) \oplus \begin{pmatrix} h_{33} & 0 & t & t \\ 0 & -h_{33} & t & t \\ t & t & U & 0 \\ t & t & 0 & U \end{pmatrix} - \frac{1}{2} h_i (\mu_k + \mu_{k+1}) \mathbf{1},$$

где

$$h_{11} = \frac{1}{2}(I_1 + I_2)(\mu_k + \mu_{k+1}) - h_e, \quad h_{33} = \frac{1}{2}(I_1 - I_2)(\mu_k - \mu_{k+1}),$$

$\mathbf{1}$ — единичная матрица. Находим собственные значения матрицы $\mathcal{H}_k$:

$$\begin{aligned}
\mathcal{E}_1(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \frac{1}{2}(I_1 + I_2)(\mu_k + \mu_{k+1}) - h_e - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\
\mathcal{E}_2(\mu_k, \mu_{k+1}) &= -\frac{1}{2}(I_1 + I_2)(\mu_k + \mu_{k+1}) + h_e - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\
\mathcal{E}_3(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \Lambda_1 |\mu_k - \mu_{k+1}| - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\
\mathcal{E}_4(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \frac{1}{2}\left(U - \sqrt{U^2 + 16t^2}\right)|\mu_k + \mu_{k+1}| + \Lambda_2 |\mu_k - \mu_{k+1}| - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\
\mathcal{E}_5(\mu_k, \mu_{k+1}) &= \frac{1}{2}\left(U + \sqrt{U^2 + 16t^2}\right)|\mu_k + \mu_{k+1}| + \Lambda_3 |\mu_k - \mu_{k+1}| - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}), \\
\mathcal{E}_6(\mu_k, \mu_{k+1}) &= U - \frac{h_i}{2}(\mu_k + \mu_{k+1}),
\end{aligned} \qquad (3)$$

где Λ_i — это собственные значения матрицы

$$\mathcal{L} = \begin{pmatrix} 0 & \frac{I_1 - I_2}{2} & 0 \\ \frac{I_1 - I_2}{2} & 0 & 2t \\ 0 & 2t & U \end{pmatrix}.$$

В итоге получаем

$$\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1}) = \sum_{i=1}^{6} \exp[-\beta \mathcal{E}_i(\mu_k, \mu_{k+1})].$$

Делаем декорационно-итерационное преобразование для $\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1})$ [1,2,15]:

$$\mathcal{Z}_k(\mu_k, \mu_{k+1}) = A \exp[\beta R \mu_k \mu_{k+1} + \beta h_0 (\mu_k + \mu_{k+1})/2],$$

где параметры преобразования A, R и h_0 определяются такими соотношениями:

$$A = \left[\mathcal{Z}_k\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \mathcal{Z}_k\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \mathcal{Z}_k^2\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)\right]^{\frac{1}{4}},$$

$$\beta R = \ln\left[\mathcal{Z}_k\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \mathcal{Z}_k\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right) \mathcal{Z}_k^{-2}\left(\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)\right],$$

$$\beta h_0 = \ln\left[\mathcal{Z}_k\left(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}\right) \mathcal{Z}_k^{-1}\left(-\frac{1}{2}, -\frac{1}{2}\right)\right].$$

Этим преобразованием вычисление статистической суммы цепочки Изинга–Хаббарда (2) сводится к вычислению статистической суммы цепочки Изинга с взаимодействием R и магнитным полем h_0. Используя известный результат для статистической суммы цепочки Изинга [18], получаем статистическую сумму (2) в виде:

$$\mathcal{Z} = A^N(\lambda_1^N + \lambda_2^N),$$

где

$$\lambda_{1,2} = \exp\left(\frac{\beta R}{4}\right)\mathrm{ch}\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) \pm$$

$$\pm\sqrt{\exp\left(\frac{\beta R}{2}\right)\mathrm{sh}^2\left(\frac{\beta h_0}{2}\right) + \exp\left(-\frac{\beta R}{2}\right)}.$$

Свободная энергия, которая приходится на одну примитивную ячейку, в термодинамическом пределе имеет такой вид:

$$f = -\frac{1}{\beta}\ln A - \frac{1}{\beta}\ln\lambda_1.$$

Из свободной энергии рассчитываем энтропию s и теплоемкость c:

$$s = k_B\beta^2\left(\frac{\partial f}{\partial\beta}\right)_{h_i,h_e}, \qquad c = -\beta\left(\frac{\partial s}{\partial\beta}\right)_{h_i,h_e}.$$

Расчет намагниченности $m_i = \frac{1}{2}\langle\mu_k + \mu_{k+1}\rangle$ и корреляционной функции $q_{ii}(n) = \langle\mu_k\mu_{k+n}\rangle$ изинговских спинов цепочки Изинга–Хаббарда сводится к расчету этих же характеристик для цепочки Изинга с взаимодействием R и магнитным полем h_0. Поэтому для m_i и $q_{ii}(n)$ используем известные результаты [18]. Намагниченность электронной подсистемы $m_e = \frac{1}{2}\langle S_{k,1} + S_{k,2}\rangle$ получается дифференцированием статистической суммы $\mathcal{Z}$ по параметру h_e [19]. Таким образом, расчет намагниченности m_e сводится к дифференцированию по h_e параметров декорационно-итерационного преобразования:

$$m_e = \frac{1}{2\beta}\left(\frac{1}{A}\frac{\partial A}{\partial h_e} + q_{ii}(1)\frac{\partial(\beta R)}{\partial h_e} + m_i\frac{\partial(\beta h_0)}{\partial h_e}\right).$$

Имея намагниченности подсистем, определяем суммарную намагниченность

$$m = (m_i + 2m_e)/3.$$

Заметим, что в процессах намагничивания m, m_i и m_e будут иметь одинаковое значение насыщения $m_s = 1/2$.

Магнитная восприимчивость на действие магнитного поля h имеет такую структуру:

$$\chi = \frac{dm}{dh} = \frac{1}{3}\left(\frac{\partial m_i}{\partial h_i}\frac{dh_i}{dh} + \frac{\partial m_i}{\partial h_e}\frac{dh_e}{dh}\right) + \frac{2}{3}\left(\frac{\partial m_e}{\partial h_i}\frac{dh_i}{dh} + \frac{\partial m_e}{\partial h_e}\frac{dh_e}{dh}\right).$$

На этом завершаем рассмотрение основных моментов и результатов точного расчета термодинамических характеристик цепочки Изинга–Хаббарда.

3. Результаты и обсуждение

В полученных аналитических результатах изинговское взаимодействие может быть ферромагнитным или антиферромагнитным. Рассмотрим свойства цепочки в случае антиферромагнитного изинговского взаимодействия ($I_1, I_2 \geq 0$), при котором система геометрически фрустрированная. Без потери общности, примем $I_1 \geq I_2$ и введем разность изинговских взаимодействий $\Delta I = I_1 - I_2$, как это было сделано в [15]. Рассматриваем одинаковое для изинговских и электронных спинов магнитное поле $h = h_i = h_e$. Чтобы уменьшить число свободных параметров модели, перейдем, так же как в работе [15], к безразмерным параметрам:

$$\tilde{t} = \frac{t}{I_1}, \quad \tilde{U} = \frac{U}{I_1}, \quad \tilde{h} = \frac{h}{I_1}, \quad \Delta\tilde{I} = \frac{\Delta I}{I_1},$$

где $I_1 \neq 0$. Параметр $\Delta\tilde{I}$ имеет физическое содержание в области $0 \leq \Delta\tilde{I} \leq 1$ и характеризует возможную степень асимметрии изинговских взаимодействий для принятого искажения ромба.

Сначала рассмотрим свойства основного состояния системы. Основное состояние отвечает наименьшей энергии примитивной ячейки (3) при всех возможных значениях μ_k и μ_{k+1}. Энергии (3) в безразмерной форме $\tilde{\mathcal{E}}_i(\mu_k, \mu_{k+1}) = \mathcal{E}_i(\mu_k, \mu_{k+1})/I_1$ есть функциями четырех параметров модели: $\tilde{t}$, $\tilde{U}$, $\Delta\tilde{I}$, $\tilde{h}$. В зависимости от этих параметров основным состоянием могут быть четыре состояния, такие же, как при отсутствии кулоновского отталкивания [15], а именно: насыщенное парамагнитное состояние SPA, ферримагнитное состояние FRI, ненасыщенное парамагнитное состояние UPA и узловое антиферромагнитное состояние NAF. Приводим безразмерные энергии этих состояний в расчете на примитивную ячейку:

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{SPA}} = \frac{1}{2}(2 - \Delta\tilde{I} - 3\tilde{h}),$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{FRI}} = \frac{1}{2}(-2 + \Delta\tilde{I} - \tilde{h}),$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{UPA}} = \frac{1}{2}(\tilde{U} - \sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} - \tilde{h}),$$

$$\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}} = \min\{\tilde{\Lambda}_i, i = 1, 2, 3\},$$

где $\tilde{\Lambda}_i$ — собственные значения матрицы $\tilde{\mathcal{L}} = \mathcal{L} / I_1$. Этим состояниям отвечают такие волновые функции:

$$|\mathrm{SPA}\rangle = \prod_{k=1}^{N} |+\rangle_k \, |\uparrow,\uparrow\rangle_{k,1;k,2} \,,$$

$$|\mathrm{FRI}\rangle = \prod_{k=1}^{N} |-\rangle_k \, |\uparrow,\uparrow\rangle_{k,1;k,2} \,,$$

$$|\mathrm{UPA}\rangle = \prod_{k=1}^{N} |+\rangle_k \left[\Psi_{\mathrm{UPA}}\right]_{k,1;k,2} ,$$

$$|\mathrm{NAF}\rangle = \prod_{k=1}^{N} |(-)^{n=\left\{\substack{k \\ k+1}\right.}>_k \left[\Psi_{\mathrm{NAF}}^{(-)^n}\right]_{k,1;k,2} ,$$

где функции $|\pm\rangle_k$ описывают состояние изинговских спинов μ_k: $|+\rangle = |\uparrow\rangle$, $|-\rangle = |\downarrow\rangle$. Для записи волновых функций дважды вырожденного состояния NAF использовано выражение $(-)^{n=\left\{\substack{k \\ k+1}\right.}$, где выражение $(-)^n$ означает знак числа $(-1)^n$. Остальные обозначения:

$$\Psi_{\mathrm{UPA}} = A_{\mathrm{UPA}}(|\uparrow,\downarrow\rangle + |\downarrow,\uparrow\rangle) + B_{\mathrm{UPA}}(|\uparrow\downarrow,0\rangle + |0,\uparrow\downarrow\rangle),$$

$$\Psi_{\mathrm{NAF}}^{+} = A_{\mathrm{NAF}}^{+} \, |\uparrow,\downarrow\rangle + A_{\mathrm{NAF}}^{-} \, |\downarrow,\uparrow\rangle + B_{\mathrm{NAF}}(|\uparrow\downarrow,0\rangle + |0,\uparrow\downarrow\rangle),$$

где

$$A_{\mathrm{UPA}} = \frac{1}{2}\sqrt{1+\frac{\tilde{U}}{\sqrt{\tilde{U}^2+16\tilde{t}^2}}}, \quad B_{\mathrm{UPA}} = -\frac{1}{2}\sqrt{1-\frac{\tilde{U}}{\sqrt{\tilde{U}^2+16\tilde{t}^2}}},$$

$$A_{\mathrm{NAF}}^{\pm} = \frac{\left(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}} \pm \frac{1}{2}\Delta\tilde{I}\right)(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}} - \tilde{U})}{\sqrt{2\Phi_{\mathrm{NAF}}}}, \quad B_{\mathrm{NAF}} = \frac{2\tilde{t}\,\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}}}{\sqrt{2\Phi_{\mathrm{NAF}}}},$$

$$\Phi_{\mathrm{NAF}} = \left(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}}^2 + \frac{1}{4}\Delta\tilde{I}^2\right)(\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}} - \tilde{U})^2 + 4\tilde{t}^2\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}}^2 .$$

Рассмотрим фазовую диаграмму основного состояния в плоскости $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Ее вид определяют параметры $\tilde{t}$ и $\tilde{U}$. В зависимости от них могут реализовываться три типичные фазовые диаграммы (рис. 2), такие же, как без отталкивания [15]. Первая типичная фазовая диаграмма (рис. 2,*а*) реализуется при условии

$$\tilde{t} \le \frac{1}{4}\sqrt{1+2\tilde{U}} .$$

В нулевом поле состояния FRI и NAF сосуществуют при $\Delta\tilde{I} = \Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}$, которое определяется из уравнения

$$\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}} - 2 - 2\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{NAF}} = 0.$$

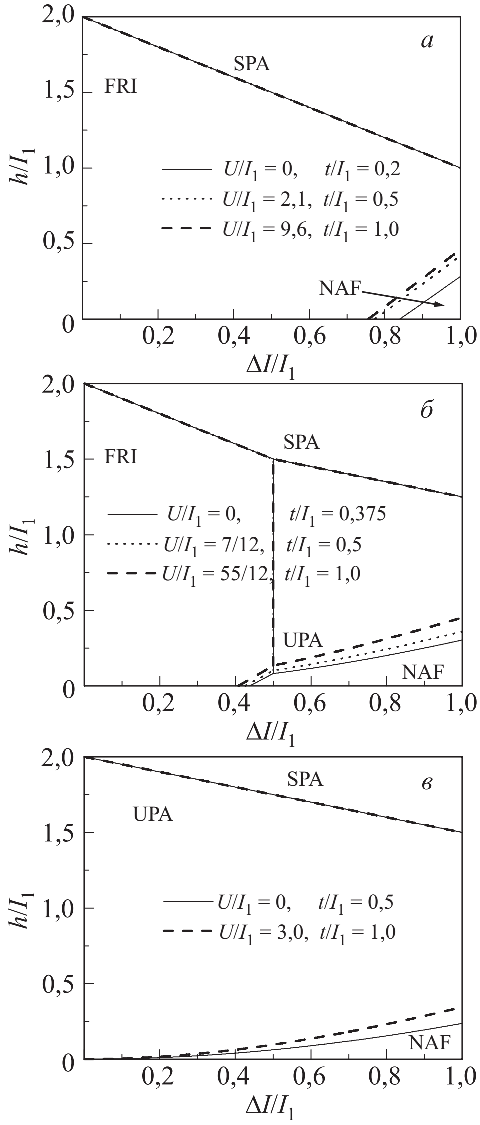


Рис. 2. Фазовая диаграмма основного состояния $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Три возможные типичные диаграммы. На каждой диаграмме приведены линии сосуществования состояний для нескольких наборов значений параметров $\tilde{U}$ и $\tilde{t}$. Результаты для случая $\tilde{U} = 0$ совпадают с соответствующими результатами работы [15].

Вторая типичная фазовая диаграмма (рис. 2,*б*) реализуется при условии

$$\frac{1}{4}\sqrt{1+2\tilde{U}} < \tilde{t} < \frac{1}{2}\sqrt{1+\tilde{U}} .$$

Состояния FRI и UPA сосуществуют на линии $\Delta\tilde{I} = \Delta\tilde{I}_{\mathrm{F|U}}$, где

$$\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F|U}} = \tilde{U} - \sqrt{\tilde{U}^2 + 16\tilde{t}^2} + 2.$$

Третья типичная фазовая диаграмма (рис. 2,*в*) реализуется при условии

$$\frac{1}{2}\sqrt{1+\tilde{U}} \le \tilde{t} .$$

Если в указанных выше соотношениях, которые характеризуют фазовую диаграмму, положить $\tilde{U} = 0$, то они совпадут с соответствующими соотношениями работы [15].

Качественное обсуждение фазовых диаграмм основного состояния на рис. 2 можно найти в работе [15]. Дополним его обсуждением интересных свойств основного состояния, выявленных в определенных случаях. Начнем с линии сосуществования состояний FRI и SPA. На этой линии также реализуется узловое антиферромагнитное состояние NAF₊ с энергией $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}_+} = -\tilde{h}$ и волновой функцией

$$|\text{NAF}_+\rangle = \prod_{k=1}^{N} |(-)^{n=\begin{cases}k\\k+1\end{cases}}\rangle_k |\uparrow,\uparrow\rangle_{k,1;k,2}$$

Поведение изинговской подсистемы описывается такими характеристиками:

$$\beta R = \beta h_0 = 0, \quad m_i = 0, \; q_{ii}(n) = 0. \qquad (4)$$

Это свидетельствует о том, что изинговские спины являются эффективно свободными, т.е. они могут с одинаковой вероятностью находиться в двух состояниях: $|\uparrow\rangle$ и $|\downarrow\rangle$. При этом междоузельные пары электронов находятся в состоянии $|\uparrow,\uparrow\rangle$. Как известно, геометрически фрустрированные системы Изинга–Гейзенберга имеют основные состояния типа мономер–димер, в которых спины Изинга являются эффективно свободными, а пары междоузельных спинов Гейзенберга находятся в определенном запутанном состоянии, и которые называют фрустрированными состояниями (FRU) [8–10]. Пользуясь этой терминологией, данное основное состояние назовем фрустрированным ферримагнитным состоянием FRU₊:

$$|\text{FRU}_+\rangle = \prod_{k=1}^{N} |\pm\rangle_k |\uparrow,\uparrow\rangle_{k,1;k,2}.$$

Состояние FRU₊ отличается от описанных в работах [8–10] фрустрированных состояний систем Изинга–Гейзенберга тем, что в нем все спины примитивной ячейки полуклассически упорядочены. Это имеет место вследствие влияния сильного магнитного поля. Эффективная свобода изинговского спина определяет макроскопическое вырождение состояния FRU₊, которое дает остаточную энтропию $s_{\text{res}} = k_B \ln 2$.

В точке $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, 2-\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}})$, где заканчивается линия сосуществования состояний FRI и SPA (рис. 2,*б*), состояние системы отличается от FRU₊. В этой точке состояние изинговской подсистемы описывается такими параметрами:

$$\beta R = \beta h_0 = \ln 2, \quad m_i = \frac{m_s}{\sqrt{5}}, \; q_{ii}(n) = \frac{1}{20} + \frac{1}{5}\left(\frac{3-\sqrt{5}}{3+\sqrt{5}}\right)^n.$$

Следовательно, изинговские спины не являются свободными. Такое состояние изинговских спинов при $R = h_0 = 0$ поясняется наличием в температурных зависимостях параметров R и h_0 линейной составляющей, которая влияет на формирование состояния изинговских спинов в пределе $T \to 0$. Это основное состояние имеет остаточную энтропию $s_{\text{res}} = k_B \ln[(3+\sqrt{5})/2]$, большую, нежели состояние FRU₊.

Рассмотрим свойства основного состояния в точке $(\Delta\tilde{I}_{F.N}, 0)$. В этом состоянии изинговские спины ведут себя свободно, согласно соотношениям (4), а состояние междоузельной пары электронов определяется состояниями соседних изинговских спинов и равновероятно может быть одним из четырех состояний: $|\uparrow,\uparrow\rangle$, $|\downarrow,\downarrow\rangle$, Ψ^-_{NAF} и Ψ^+_{NAF}. Данное основное состояние макроскопически вырождено: $s_{\text{res}} = k_B \ln 2$. Это состояние во многом сходно с фрустрированными состояниями из работ [8–10] и состоянием FRU_+. Однако, в отличие от этих состояний, оно не является состоянием типа мономер–димер. Такие же по сути свойства, как в точке $(\Delta\tilde{I}_{\text{F.N}}, 0)$, основное состояние имеет и в точке сосуществования состояний FRI, UPA и NAF $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, \tilde{h}_{\text{F|N|U}})$, где $\tilde{h}_{\text{F|N|U}} = \Delta\tilde{I}_{\text{F|U}} - 2 - 2\mathcal{E}_{\text{NAF}}$.

Свободное поведение изинговских спинов в точках $(\Delta\tilde{I}_{\text{F.N}}, 0)$ и $(\Delta\tilde{I}_{\text{F|U}}, \tilde{h}_{\text{F|N|U}})$ исчезает при их совпадении, которое возможно только в точке $(0,0)$ при $\tilde{t} = \sqrt{1+\tilde{U}}/2$ (рис. 2,*в*). В этом случае характеристики изинговской подсистемы следующие:

$$\beta R = 2\ln 2, \quad \beta h_0 = 0, \quad m_i = 0, \quad q_{ii}(n) = \frac{1}{4}\frac{1}{3^n}.$$

Наличие в этом основном состоянии ферромагнитной корреляции между изинговскими спинами обусловлено линейной составляющей в температурной зависимости параметра R. Это состояние имеет остаточную энтропию $s_{\text{res}} = k_B \ln 3$.

При $\tilde{t} > \sqrt{1+\tilde{U}}/2$ в точке $(0,0)$ реализуется фрустрированное состояние FRU:

$$|\text{FRU}\rangle = \prod_{k=1}^{N} |\pm\rangle_k \left[\Psi_{\text{UPA}}\right]_{k,1;k,2}.$$

В этом состоянии пара междоузельных электронов находится в запутанном состоянии, аналогично паре спинов Гейзенберга в фрустрированных состояниях систем Изинга–Гейзенберга [8–10]. Остаточная энтропия равна $k_B \ln 2$.

Теперь рассмотрим влияние кулоновского отталкивания $\tilde{U}$ на фазовую диаграмму $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$. Отталкивание $\tilde{U}$ влияет на нее вместе с перескоками $\tilde{t}$ через изменение энергий $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}}$ и $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{NAF}}$. Если изменение $\tilde{U}$ сопровождать изменением $\tilde{t}$ для выполнения условия неизменности энергии $\tilde{\mathcal{E}}_{\text{UPA}}$, то перестройка фазовой диаграммы $(\Delta\tilde{I}, \tilde{h})$ будет существенно проще. В частности, линия сосуществования основных состояний

FRI и UPA не изменит своего положения $\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F|U}}$. Привязав значение энергии $\tilde{\mathcal{E}}_{\mathrm{UPA}}$ в этом режиме к точке $(\tilde{t}=\tilde{t}^*, \tilde{U}=0)$, где $\tilde{t}^*$ — интеграл перескока в теории без отталкивания, получаем условие для изменения $\tilde{U}$:

$$\sqrt{\tilde{U}^2+16\tilde{t}^2}-\tilde{U}=4\tilde{t}^*. \tag{5}$$

Влияние $\tilde{U}$ в режиме (5) на фазовую диаграмму $(\Delta\tilde{I},\tilde{h})$ показано на рис. 2, где в каждом из трех случаев (*а*, *б* и *в*) наборы параметров $\tilde{U}$ и $\tilde{t}$ удовлетворяют условию (5) с определенным $\tilde{t}^*$. При таком влиянии не изменяется заданный параметром $\tilde{t}^*$ типичный вид фазовой диаграммы, а лишь несколько смещаются линии сосуществования состояния NAF с состояниями FRI и UPA. В этом смысле диаграммы для всех пар $\tilde{U}$ и $\tilde{t}$, которые посредством соотношения (5) отвечают одному $\tilde{t}^*$, эквивалентны между собой. Используя это обстоятельство, строим диаграмму $(\tilde{t},\tilde{U})$, которая отображает влияние отталкивания и перескоков на фазовую диаграмму $(\Delta\tilde{I},\tilde{h})$. Диаграмма $(\tilde{t},\tilde{U})$ представлена на рис. 3. Она покрыта «эквидиаграммными» линиями (5). На этой диаграмме легко увидеть, что увеличение $\tilde{U}$ при фиксированном $\tilde{t}$ изменяет фазовую диаграмму, аналогично как уменьшение $\tilde{t}$ при фиксированном $\tilde{U}$. Это означает, что влияние отталкивания на основное состояние состоит в эффективном ослаблении влияния интенсивности перескоков.

Переходим к изучению влияния отталкивания на полевую и температурную зависимости термодинамических характеристик. С этой целью рассмотрим изменения термодинамических характеристик при изменении отталкивания в режиме (5) сравнительно с результатами работы [15]. Рассматриваем наборы значений $\tilde{U}$ и $\tilde{t}$, для которых фазовая диаграмма основного состояния показана на рис. 2,*б*. Начнем с процесса намагничивания при низких температурах. Влияние отталкивания зависит от того, какое состояние, FRI или NAF, является основным в нулевом поле. В случае основного состояния FRI влияния отталкивания практически не видно (рис. 4,*а*), а в случае основного состояния NAF оно проявляется существенно (рис. 5,*а*). Это обстоятельство связано с тем, что рост отталкивания увеличивает значение критического поля, при котором плато нулевой намагниченности переходит в плато $1/3$ намагниченности насыщения (рис. 5,*а*). В результате этого кривая намагничивания при температуре 0.05 для $\tilde{U}=55/12$, в отличие от $\tilde{U}=0$ [15], демонстрирует размытие плато нулевой намагниченности (рис. 5,*а*). Увеличение полевого промежутка с нулевой намагниченностью отражается также на поведении низкотемпературных кривых намагниченности при соответствующих магнитных полях (рис. 5,*б*).

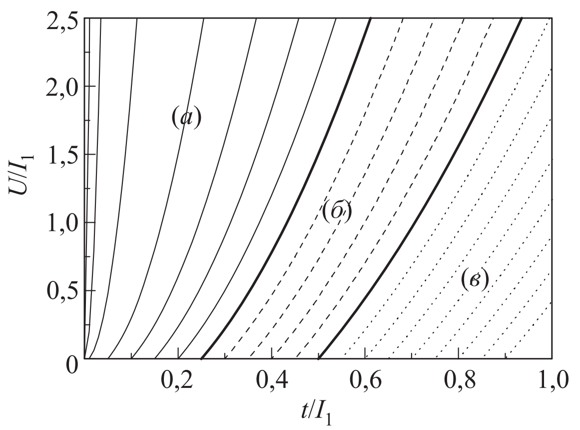


Рис. 3. Диаграмма влияния перескоков и отталкивания $(\tilde{t},\tilde{U})$ на вид фазовой диаграммы основного состояния $(\Delta\tilde{I},\tilde{h})$. (*а*), (*б*), (*в*) обозначают области существования изображенных на рис. 2 типов фазовой диаграммы $(\Delta\tilde{I},\tilde{h})$. Области покрыты «эквидиаграммными» линиями: тонкими сплошными (*а*), штриховыми (*б*) и пунктирными (*в*). Границы между областями изображены толстыми сплошными «эквидиаграммными» линиями.

Независимо от того, какое основное состояние реализуется в нулевом поле, увеличение отталкивания смещает высокотемпературную суммарную намагниченность вверх (рис. 4,*б* и рис. 5,*б*). Чтобы понять механизм этого смещения, рассмотрим температурную зависимость намагниченностей изинговской и электронной подсистем (рис. 6). Обнаруживается, что при увеличении отталкивания высокотемпературные кривые намагниченности этих подсистем испытывают противоположные смещения: высокотемпературная кривая намагниченности изинговской подсистемы смещается вниз (рис. 6,*а*), а высокотемпературная кривая намагниченности электронной подсистемы — вверх (рис. 6,*б*). Поскольку электронная подсистема вдвое больше изинговской, она определяет направление смещения высокотемпературной суммарной намагниченности. Анализ числовых результатов показал, что это уменьшение высокотемпературной намагниченности изинговских спинов связано с уменьшением эффективного магнитного поля h_0. Увеличение же высокотемпературной намагниченности электронной подсистемы может быть объяснено увеличением по крайней мере двух высоких энергий в спектре гамильтониана $\mathcal{H}_k$ (3), которым отвечает нулевая намагниченность междоузельной пары электронов, а именно $\mathcal{E}_5$ и $\mathcal{E}_6$.

Если асимметрия изинговских взаимодействий $\Delta\tilde{I}$ попадает в определенную окрестность критической точки $\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}$, или в область основного состояния NAF, то низкотемпературные кривые магнитной восприимчивости, умноженной на температуру $(\chi k_B T)$, в нулевом поле испытывают существенные изменения под влиянием отталкивания (рис. 7). Эти изменения могут быть связаны с уменьшением энергии основного состояния NAF при росте отталкивания, аналогично изменению кривых намагничивания. Высокотемпературные кривые $\chi k_B T$ при увеличении отталкивания смещаются в область более высоких значений.

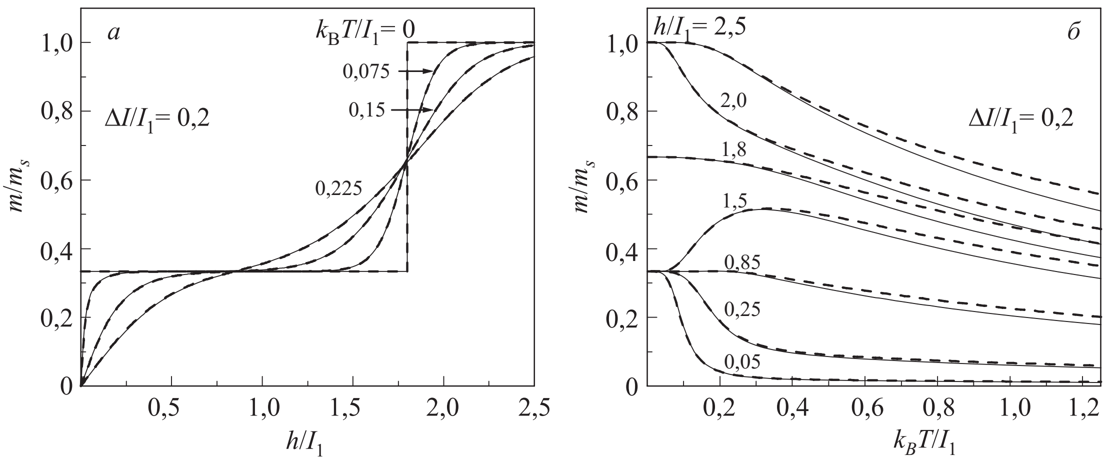


Рис. 4. Суммарная намагниченность в зависимости от магнитного поля при разных температурах (*а*) и от температуры при разных магнитных полях (*б*) для случая, когда состояние FRI является основным в нулевом поле. Сплошными линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 0$ и $\tilde{t} = 0{,}375$, которые совпадают с соответствующими результатами работы [15]. Штриховыми линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 55/12$ и $\tilde{t} = 1{,}0$.

Рассмотрим влияние отталкивания на температурную зависимость теплоемкости в нулевом поле. При $\tilde{U} = 0$ в этой зависимости было обнаружено два максимума [15]: главный и ближе к нулю температуры второстепенный (рис. 8), появление которого связывалось с тепловыми возбуждениями, ответственными за переходы между состояниями FRI и NAF. При $\tilde{U} = 55/12$, в отличие от $\tilde{U} = 0$, высокотемпературная зависимость теплоемкости на рис. 8 имеет главный максимум ощутимо меньшей высоты и дополнительно очень широкий низкий максимум при значительно более высокой температуре, чем температура главного максимума. Этот дополнительный максимум возникает только при сильном отталкивании. При $\tilde{U} = 7/12$ он еще не возникает, лишь перестраивается главный максимум: понижается, расширяется и несколько смещается к более высоким температурам. Все это указывает на то, что главный максимум связан не только с теми тепловыми возбуждениями, которые разрушают вызванные наибольшим изинговским взаимодействием I_1 димеро-подобные антиферромагнитные корреляции между изинговскими и электронными спинами [15], но и с теми тепловыми возбуждениями, которые разрушают антиферромагнитные корреляции между спинами

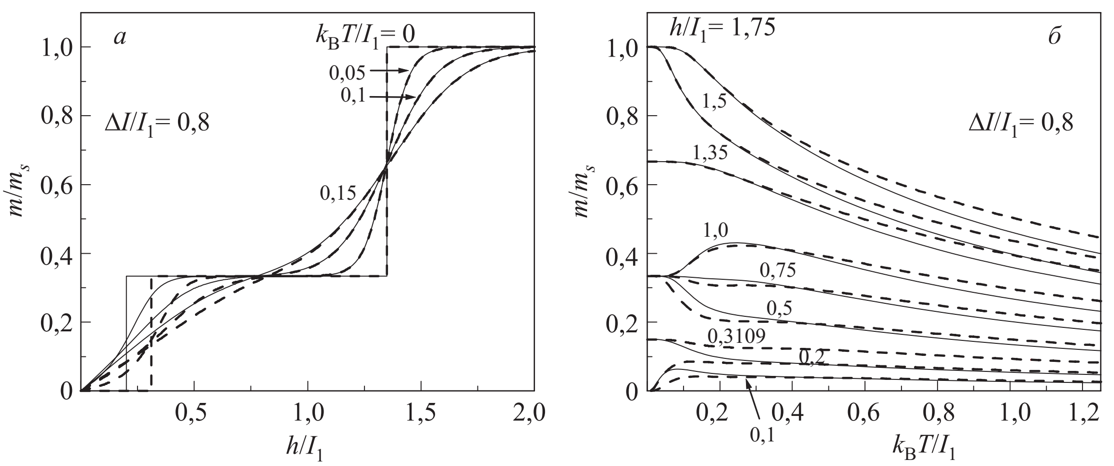
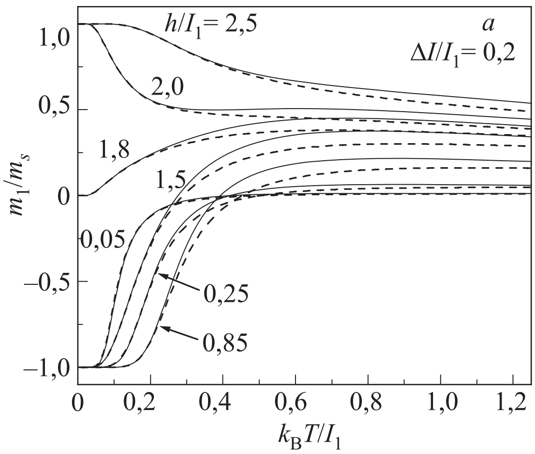


Рис. 5. Суммарная намагниченность в зависимости от магнитного поля при разных температурах (*а*) и от температуры при разных магнитных полях (*б*) для случая, когда состояние NAF является основным в нулевом поле. Сплошными линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 0$ и $\tilde{t} = 0{,}375$, которые совпадают с соответствующими результатами работы [15]. Штриховыми линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 55/12$ и $\tilde{t} = 1{,}0$.



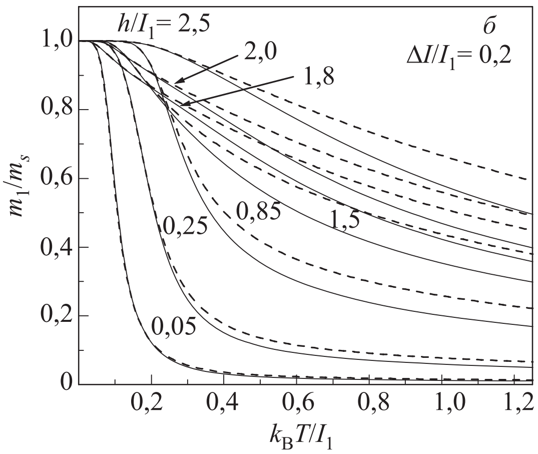


Рис. 6. Намагниченности изинговской (*а*) и электронной (*б*) подсистем в зависимости от температуры при разных магнитных полях. Эти намагниченности формируют суммарную намагниченность на рис. 4,*б*. Сплошными линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 0$ и $\tilde{t} = 0{,}375$. Штриховыми линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 55/12$ и $\tilde{t} = 1{,}0$.

междоузельной пары электронов, и которые преодолевают однопозиционное кулоновское отталкивание электронов. При изменении отталкивания низкотемпературная часть теплоемкости, которая включает второстепенный максимум, в случае принадлежности $\Delta\tilde{I}$ области основного состояния FRI практически не изменяется (рис. 8,*а*), а в случае принадлежности $\Delta\tilde{I}$ области основного состояния NAF существенно изменеияется (рис. 8,*б*).

Низкотемпературная теплоемкость в нулевом поле, кроме структуры с одним второстепенным максимумом (рис. 8), может иметь структуру с двумя второстепенными максимумами (рис. 9). Возникновение ближайшего к нулю температуры дополнительного максимума теплоемкости (рис. 9) не связано с учетом отталкивания, так как имеет место также при $\tilde{U} = 0$. Этот максимум возникает, когда параметр $\Delta\tilde{I}$ попадает в достаточно маленькую окрестность критической точки $\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}$. Если проходить эту окрестность из основного состояния FRI, то второстепенный максимум теплоемкости разделяется на два максимума. При дальнейшем приближении к критической точке $\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}$ отвечающий меньшей температуре максимум быстро приближается к нулю температуры и в критической точке исчезает (рис. 9,*а*). За критической точкой в состоянии NAF он появляется снова возле нуля температуры. При отдалении от критической точки он быстро приближается к другому низкотемпературному максимуму и сливается с ним (рис. 9,*б*). Из изложенного выше следует, что именно исчезающий в критической точке $\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}$ максимум связан с тепловыми возбуждениями, которые отвечают за переходы между состояниями FRI и NAF. А неисчезающий в критической точке $\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}$ низкотемпературный максимум связан с тепловыми возбуждениями, которые отвечают за переходы между состояниями FRI и UPA и состояниями NAF и UPA.

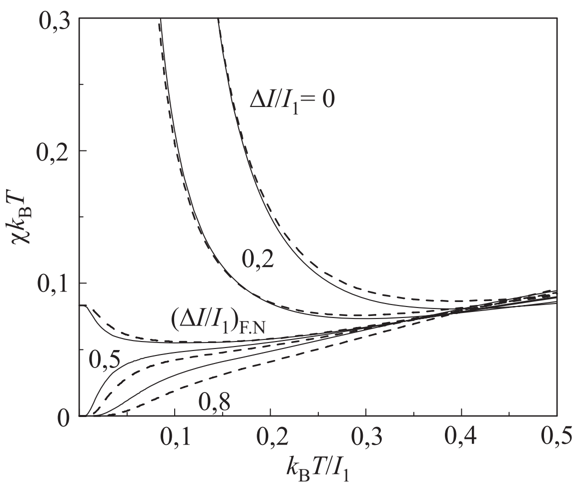


Рис. 7. Умноженная на температуру магнитная восприимчивость в нулевом поле в зависимости от температуры. Сплошными линиями изображены результаты $\tilde{U} = 0$ и $\tilde{t} = 0{,}375$, которые совпадают с соответствующими результатами работы [15]. Штриховыми линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 55/12$ и $\tilde{t} = 1{,}0$.

4. Заключение

Для искаженной ромбической цепочки Изинга-Хаббарда с учетом одноцентрового кулоновского отталкивания методом декорационно-итерационного преобразования точно рассчитаны термодинамические характеристики: свободная энергия, энтропия, теплоемкость, намагниченность изинговской и электронной подсистем, магнитная восприимчивость. В случае антиферромагнитного взаимодействия Изинга,

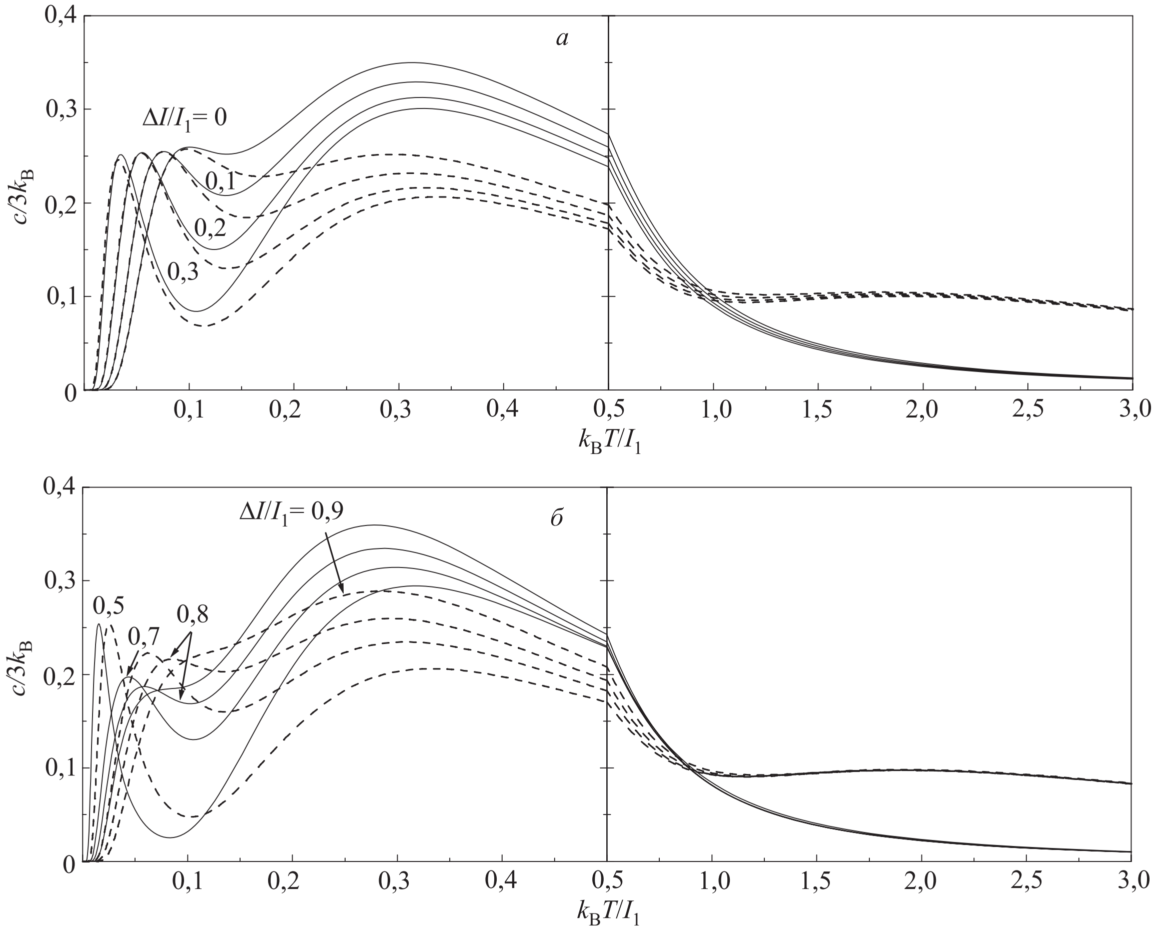


Рис. 8. Теплоемкость в нулевом поле в зависимости от температуры для двух случаев: FRI является основным состоянием (*а*) и NAF является основным состоянием (*б*). Сплошными линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 0$ и $\tilde{t} = 0{,}375$, которые совпадают с соответствующими результатами работы [15]. Штриховыми линиями изображены результаты при $\tilde{U} = 55/12$ и $\tilde{t} = 1{,}0$.

когда система геометрически фрустрированная, исследовано влияние кулоновского отталкивания на основное состояние и в режиме (5) на термодинамику: намагниченность в зависимости от поля и температуры, магнитную восприимчивость и теплоемкость в зависимости от температуры.

В системе с кулоновским отталкиванием реализуются такие же четыре основные состояния (SPA, FRI, UPA, NAF) и такие же три типичные фазовые диаграммы основного состояния ($\Delta\tilde{I}, \tilde{h}$), как в системе без кулоновского отталкивания [15]. Изменение отталкивания, которое сопровождается таким изменением интенсивности перескоков, чтобы энергия состояния UPA оставалась неизменной, не изменяет тип фазовой диаграммы основного состояния, а лишь смещает граничные линии области основного состояния NAF. Влияние отталкивания и перескоков на вид фазовой диаграммы ($\Delta\tilde{I}, \tilde{h}$) изображено диаграммой ($\tilde{t}, \tilde{U}$). Таким образом, реализовано полное описание свойств основного состояния в зависимости от параметров модели. Установлено, что возрастание кулоновского отталкивания эффективно ослабляет влияние интенсивности перескоков на основное состояние.

Изучены свойства основного состояния на некоторых критических линиях и в критических точках фазовых диаграмм ($\Delta\tilde{I}, \tilde{h}$). На линии сосуществования состояний FRI и SPA и при $\tilde{t} > \sqrt{1+\tilde{U}}/2$ в точке (0, 0) реализуется фрустрированное состояние. В точке $(\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F|U}}, 2-\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F|U}})$, где заканчивается линия сосуществования состояний FRI и SPA, основное состояние отличается от фрустрированного из-за наличия линейной составляющей в температурных зависимостях параметров R и h_0, которая определяет основное состояние изинговской подсистемы в случае $R = h_0 = 0$. Это состояние имеет остаточную энтропию $s_{\mathrm{res}} = k_B \ln[(3+\sqrt{5})/2]$, бо́льшую, нежели фрустрированное состояние. В точках $(\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F.N}}, 0)$ и $(\Delta\tilde{I}_{\mathrm{F|U}}, \tilde{h}_{\mathrm{F|N|U}})$ изинговские спины являются эффективно свободными, а состояние междоузельной пары электронов однозначно определяется состояниями соседних изинговских спинов. При совпадении этих точек в точке $(0,0)$ изинговские спины уже не являются эффективно сво-

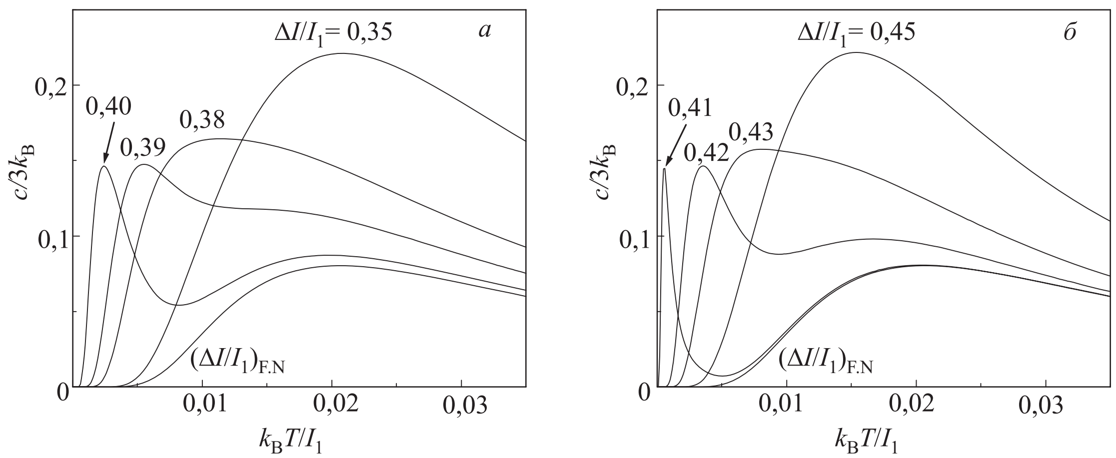


Рис. 9. Теплоемкость в нулевом поле в зависимости от температуры для $\tilde{t} = 1.0$ и $\tilde{U} = 55/12$ при разных $\Delta\tilde{I}$ из маленькой окрестности критической точки $\Delta\tilde{I}_{\rm F.N}$. Отображено приближение $\Delta\tilde{I}$ из области основного состояния FRI к критической точке $\Delta\tilde{I}_{\rm F.N}$ (*а*) и отдаление $\Delta\tilde{I}$ от критической точки $\Delta\tilde{I}_{\rm F.N}$ вглубь области основного состояния NAF (*б*).

бодными. Вместе с тем это основное состояние имеет наибольшую остаточную энтропию $s_{\rm res} = k_B \ln 3$.

Влияние кулоновского отталкивания на процессы низкотемпературного намагничивания, низкотемпературные кривые намагниченности и магнитной восприимчивости ощутимо вблизи границы основного состояния NAF вследствие ее смещения. Высокотемпературные кривые намагниченности подсистем при возрастании кулоновского отталкивания смещаются противоположно: электронной подсистемы — к увеличению намагниченности, а изинговской подсистемы — к уменьшению намагниченности. При этом высокотемпературная кривая суммарной намагниченности смещается в область более высоких значений. Аналогично смещается высокотемпературная магнитная восприимчивость. Возрастание кулоновского отталкивания уменьшает высоту главного максимума теплоемкости, а при асимметрии изинговских взаимодействий из области основного состояния NAF перестраивает еще и второстепенный максимум теплоемкости. Сильное отталкивание предопределяет появление дополнительного максимума теплоемкости, который расположен значительно выше температуры главного максимума.

Обнаружено, что независимо от наличия кулоновского отталкивания теплоемкость в нулевом поле при попадании асимметрии изинговских взаимодействий в достаточно маленькую окрестность критической точки $\Delta\tilde{I}_{\rm F.N}$ имеет два низкотемпературных максимума. Ближайший к нулю температуры максимум исчезает в критической точке $\Delta\tilde{I}_{\rm F.N}$, то есть он связан с тепловыми возбуждениями, отвечающими за переходы между состояниями FRI и NAF.

Автор благодарен О.В. Держко и Т.М. Верхоляку за обсуждение и полезные замечания.

1. I. Syozi, *Prog. Theor. Phys*. **6**, 341 (1951).
2. M. Fisher, *Phys. Rev*. **113**, 969 (1959).
3. T. Kaneyoshi, *Prog. Theor. Phys*. **97**, 407 (1997).
4. V.R. Ohanyan and N.S. Ananikian, *Phys. Lett*. **A307**, 76 (2003).
5. J.S. Valverde, Onofre Rojas, and S.M. de Souza, *Physica* **A387**, 1947 (2008).
6. J. Strečka and M. Jaščur, *J. Phys.: Condens. Matter* **15**, 4519 (2003).
7. J. Strečka, M. Jaščur, M. Hagiwara, K. Minami, Y. Narumi, and K. Kindo, *Phys. Rev*. **B72**, 024459 (2005).
8. L. Čanová, J. Strečka, M. and Jaščur, *J. Phys.: Condens. Matter* **18**, 4967 (2006).
9. L. Čanová, J. Strečka, and T. Lučivjanský, *Condens. Matter Phys*. **12**, 353 (2009).
10. V. Ohanyan, *Condens. Matter Phys*. **12**, 343 (2009).
11. J.S. Valverde, Onofre Rojas, and S.M. de Souza, *J. Phys.: Condens. Matter* **20**, 345208 (2008).
12. D. Antonosyan, S. Bellucci, and V. Ohanyan, *Phys. Rev*. **B79**, 014432 (2009).
13. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, *Phys. Rev. Lett*. **94**, 227201 (2005).
14. H. Kikuchi, Y. Fujii, M. Chiba, S. Mitsudo, T. Idehara, T. Tonegawa, K. Okamoto, T. Sakai, T. Kuwai, and H. Ohta, *Prog. Theor. Phys. Suppl*. **159**, 1 (2005).
15. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, and M.L. Lyra, *Phys. Rev*. **B77**, 024402 (2008).
16. O. Derzhko, A. Honecker, and J. Richter, *Phys. Rev*. **B79**, 054403 (2009).
17. M.S.S. Pereira, F.A.B.F. de Moura, and M.L. Lyra, *Phys. Rev*. **B79**, 054427 (2009).
18. Р. Бэкстер, *Точно решаемые модели в статистической механике*, Мир, Москва (1985).
19. B. Lisnii, *Ukr. J. Phys*. **53**, 708 (2008).

Distorted diamond Ising–Hubbard chain

B.M. Lisnii

The ground state and the thermodynamics of a distorted diamond Ising-Hubbard chain are studied with taking into account the on-site Coulomb repulsion. Exact results for free energy, entropy, specific heat, magnetizations of Ising and Hubbard subsystems, and magnetic susceptibility are obtained by using the method of decoration-iteration transformation. In the case of geometric frustration the effect of Coulomb repulsion on ground state, field and temperature dependences of magnetization, magnetic susceptibility, specific heat is analyzed. Strong repulsion gives rise to an additional high-temperature maximum of the specific heat. Despite of presence of the repulsion, the specific heat may have two low-temperature peaks.

PACS: 75.10.Pq Spin chain models;
75.40.Cx Static properties;
75.50.Gg Ferrimagnetics;
75.10.Jm Quantized spin models, including quantum spin frustration.

Keywords: spin-electron chain, exactly solvable model, geometric frustration, ground state, magnetization plateau, specific heat.