

**Streszczenie**  
**rozprawy doktorskiej mgr Katarzyny Jaśniewicz – Pacer**  
**pt: „Stan podstawowy skończonych układów spinowych opisywanych modelem**  
**Heisenberga w obecności oddziaływań konkurujących.**  
**Model kwantowy oraz granica klasyczna**

Badanie modeli magnesów jednomolekułowych jest niezwykle istotne ze względu na ich możliwe w wielu obszarach: od spintroniki do nanomedycyna. Niniejsza rozprawa poświęcona jest analizie wpływu oddziaływań konkurujących na właściwości stanu podstawowego. W szczególności, weryfikowana jest możliwość wystąpienia stanu podstawowego charakterystycznego dla układu bez oddziaływań konkurujących w układach, w których takie oddziaływania są obecne. Szersza analiza obejmuje sporządzenie swoistego „diagramu fazowego” dla całego zakresu parametrów hamiltonianu.

Praca dotyczy dwóch heterogenicznych układów:

- centrowanych wielokątów o parzystej liczbie wierzchołków, w których występują naprzemienne sprzężenia najbliższych sąsiadów;
- wielokątów (o liczbie wierzchołków podzielnej przez cztery) z alternującymi sprzężeniami drugich sąsiadów.

W obu przypadkach badany jest kwantowy model Heisenberga oraz jego granica klasyczna, a jako punkt odniesienia rozpatrywany jest także odpowiedni model Isinga. Wszystkie modele są charakteryzowane przez dwie całki wymiany,  $\alpha$  oraz  $\beta$ , dobrane w taki sposób, że oddziaływania konkurujące występują, gdy  $\alpha > 0$  lub  $\beta > 0$ . Wspomniany wcześniej diagram fazowy jest zatem sporządzany w płaszczyźnie  $\alpha$   $\beta$ . Rozpatrywane układy oraz stosowane metody badania są krótko omówione w Rozd. 2. W kolejnych rozdziałach analizowane są poszczególne modele wskazane powyżej. We wszystkich przypadkach obserwujemy wystąpienie dobrze określonego zakresu parametrów, w którym występują oddziaływania konkurujące ( $\alpha > 0$  i/lub  $\beta > 0$ ), a mimo to w przypadku modelu Isinga stan podstawowy jest niezdegenerowany, konfiguracja o najniższej energii w modelu klasycznym jest nadal kolinearna, a stan podstawowy modelu Heisenberga zachowuje spin całkowity oraz symetrie. Wykazano, że podstawowe wartości krytyczne są ze sobą związane (tzn. te dla modelu Isinga są dwukrotnie wyższe niż w pozostałych modelach) i zależą od stosunku liczb spinowych w rozpatrywanym układzie. Powyżej wartości krytycznych większość układów zachowuje się w oczekiwany i niejako standardowy sposób:

- w przypadku modelu Isinga obserwujemy znaczny wzrost degeneracji stanu podstawowego;
- układ kwantowy wykazuje ściśle określona sekwencje stanów podstawowych przy wzrastających wartościach parametru  $\alpha > 0$  i/lub  $\beta > 0$ ;
- w granicy klasycznej kąt między wektorami zmieniają się w sposób ciągły, dążąc do (ale nie osiągając) całkowicie antyferromagnetycznej konfiguracji. Wyjątek stanowi klasyczny układ spinów z alternującymi sprzężeniami drugich sąsiadów.

W pewnym zakresie parametrów zmiana kątów pomiędzy wektorami spinowymi odbywa się w sposób skokowy, a w pełni antyferromagnetyczna konfiguracja dwóch podukładów jest osiągnięta dla skończonych wartości parametrów  $\alpha$ ;  $\beta$  leżących powyżej hiperboli  $\alpha \beta = c \frac{2}{n} n$ , gdzie współrzędne ( $c_n$ ;  $c_n$ ) wierzchołka hiperboli rosną wraz ze zwiększaniem układu (wzrostem liczby  $n$ ).

We wszystkich przypadkach sporządzone zostały odpowiednio „diagramy fazowe”, których analiza pozwala na wskazanie krytycznych wartości parametrów. Pomimo tego, że modele są bardzo uproszczone (całkowicie izotropowe, bez zewnętrznego pola magnetycznego itp.), to wyznaczenie tych wartości pozwala określić, czy parametry aktualnie badanego układu (rzeczywistego magnezu jednomolekułowego) są blisko tych linii i punktów krytycznych. W takiej sytuacji niewielka zmiana parametrów układu (np. otrzymanych w procedurze dopasowania modelu do wyników eksperymentu) może powodować istotne zmiany w przewidywanych właściwościach układu. Wyniki otrzymane w trakcie realizacji rozprawy wskazują również kilka problemów, które wymagają dokładniejszej analizy wykraczającej poza zakres niniejszej rozprawy. W szczególności dotyczy to występowania niewielkich obszarów w diagramach fazowych, gdzie zachowanie się stanu podstawowego jest wyraźnie różne od przebiegu linii krytycznych dla relatywnie bliskich innych wartości parametrów.