

НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ УНИВЕРСИТЕТ  
"ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"

МОСКОВСКИЙ ИНСТИТУТ ЭЛЕКТРОНИКИ И МАТЕМАТИКИ им. А.Н.Тихонова  
НАЦИОНАЛЬНОГО ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКОГО УНИВЕРСИТЕТА  
"ВЫСШАЯ ШКОЛА ЭКОНОМИКИ"

# МАТЕРИАЛЫ КОНФЕРЕНЦИИ 2017

МЕЖВУЗОВСКАЯ НАУЧНО - ТЕХНИЧЕСКАЯ  
КОНФЕРЕНЦИЯ СТУДЕНТОВ, АСПИРАНТОВ  
И МОЛОДЫХ СПЕЦИАЛИСТОВ  
имени Е.В. АРМЕНСКОГО



# ВЛИЯНИЕ РАЗРЫВОВ ЦЕПОЧКИ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ СВОЙСТВА ХАЛДЕЙНОВСКОЙ ЦЕПОЧКИ

**A.В. Никифоров**  
**НИУ ВШЭ,**  
**департамент электронной инженерии**  
**МИЭМ НИУ ВШЭ**

## Аннотация

В работе было изучено влияние взаимодействия спинов  $S=1/2$ , появляющихся на концах сегментов халдейновской цепочки, на температурные зависимости теплоемкости, магнитной восприимчивости, намагниченности.

## Введение

В кристаллах, содержащих в своей структуре халдейновские цепочки ( $S=1$ ), образуется неупорядоченное основное состояние со щелью в спектре магнитных возбуждений[1]. Основное состояние таких систем представляет собой устойчивую простую валентную связь (VBS). Согласно этой модели, каждый из спинов  $S=1$  в цепочке представляется в виде двух квазичастиц с спином  $S=1/2$ , связанных антиферромагнитным взаимодействием с квазичастицей соседнего иона. Если происходит разрыв цепочки, то на ее концах возникают нескомпенсированные спины  $S=1/2$ , которые могут взаимодействовать друг с другом [2]. Наличие спинов  $S=1/2$  на концах сегментов подтверждается данными ЭПР исследований в  $\text{PbNi}_2\text{V}_2\text{O}_8$  [3], в органическом соединении NENP [4] и в  $\text{Y}_2\text{BaNiO}_5$  при частичной замене ионов  $\text{Ni}^{2+}$  на немагнитные примеси  $\text{Zn}^{2+}$  и  $\text{Mg}^{2+}$  [5]-[7]. Гамильтониан для двух взаимодействующих спинов  $S=1/2$  в такой системе имеет следующий вид:

$$\hat{H} = J(\hat{S}_1\hat{S}_2) + D\hat{S}_z^2 - g\mathbf{m}_B\hat{S}_i\mathbf{H}_i$$

где  $J$  - константа обменного взаимодействия спинов  $S=1/2$ , возникающих на концах сегментов цепочки,  $D$  - параметр одноионной анизотропии, а последний член - энергия Зеемана во внешнем магнитном поле  $H$ .

Взаимодействие нескомпенсированных спинов  $S=1/2$  расщепляет четырехкратно вырожденный уровень на синглетное и триплетное состояния, которые разделены энергетической щелью  $\Delta_1 = J$ . От четного или нечетного количества магнитных ионов в сегменте цепочки зависит, каким будет основное состояние системы: синглетным или триплетным. При четном количестве магнитных ионов в сегменте цепочки основное состояние будет синглетным, при нечетном - триплетным. Дальнейшее расщепление триплета  $\Delta_2$  на два подуровня обусловлено одноионной анизотропией магнитного иона внутри цепочки.

## Анализ зависимостей теплоемкости и магнитной восприимчивости

Температурная зависимость теплоемкости, имеющая вид аномалии Шоттки, определяется перераспределением электронов по расщепленным подуровням основного состояния сегмента цепочки. Для заданной модели в отсутствие магнитного поля она равна

$$C_{H=0} = nR \frac{2 \cdot (x_1 + x_2)^2 \cdot e^{(x_1 - x_2)}}{(1 + 2 \cdot e^{-x_2} + e^{x_1})^2} + \frac{2 \cdot x_2^2 \cdot e^{-x_2} + x_1^2 e^{x_1}}{(1 + 2 \cdot e^{-x_2} + e^{x_1})^2}$$

где

$$x_1 = \frac{\Delta_1}{kT}, x_2 = \frac{\Delta_2}{kT}, x_3 = \frac{g\mathbf{m}_B H}{kT}, x_4 = \sqrt{\left(\frac{x_2}{2}\right)^2 + x_3^2}$$

где  $k$  - постоянная Больцмана,  $g = 2$ ,  $\mathbf{m}_B$  - магнетон Бора,  $n$  - концентрация взаимодействующих пар спинов  $S=1/2$ .

Если основным состоянием системы сегментов цепочки является синглет, то параметры  $\Delta_1$  и  $\Delta_2$  принимают положительное значение, если основное состояние – триплет, то значения указанных параметров отрицательны.

Когда система находится в синглетном основном состоянии, то при фиксированном  $\Delta_1$  максимум теплоемкости смещается в сторону более высоких температур при увеличении  $\Delta_2$ . При значениях  $\Delta_2 > 10K$  на температурной зависимости теплоемкости появляется два максимума, один из которых не смещается при дальнейшем увеличении параметра  $\Delta_2$ . Если значение параметра  $\Delta_2$  фиксировано, то максимум теплоемкости смещается в сторону более высоких температур при увеличении  $\Delta_1$ . Отметим, что аналогичные тенденции наблюдаются при замене  $\Delta_1$  на  $-\Delta_2$ , и  $\Delta_2$  на  $-\Delta_1$ .

Магнитная восприимчивость при поле  $H$ , направленном вдоль оси  $Z$ , определяется так:

$$C_{H\parallel Z} = n \frac{\frac{2g^2\mathbf{m}_B^2}{kT} e^{-\frac{\Delta_1+\Delta_2}{kT}}}{1 + e^{-\frac{\Delta_1}{kT}} + 2e^{-\frac{\Delta_1+\Delta_2}{kT}}}$$

где  $g = 2$ ,  $\mathbf{m}_B$  - магнетон Бора,  $n$  - концентрация взаимодействующих пар спинов  $S=1/2$ .

При поле  $H$ , направленном вдоль  $X$  или  $Y$ :

$$C_{H\parallel X,Y} = n \frac{\frac{2g^2\mathbf{m}_B^2}{\Delta_2} \left( e^{-\frac{\Delta_1}{kT}} - e^{-\frac{\Delta_1+\Delta_2}{kT}} \right)}{\left( 1 + e^{-\frac{\Delta_1}{kT}} + 2e^{-\frac{\Delta_1+\Delta_2}{kT}} \right)}$$

На Рис.1 изображены температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости при  $n=1$ . Видно, что как в случае синглетного основного состояния, так и в случае триплетного является, зависимость теплоемкости имеет вид аномалии Шоттки, и положение максимума зависит от параметров  $\Delta_1, \Delta_2$ . При одинаковых параметрах  $\Delta_1, \Delta_2$  положение максимума достигается при одинаковых температурах.

Температурная зависимость магнитной восприимчивости имеет максимум только в случае синглетного основного состояния. Максимум на зависимости  $C(T)$  смещен в сторону более высоких температур по отношению к максимуму аномалии Шоттки на зависимости  $C(T)$ . Когда основным состоянием системы сегментов цепочки является триплет, то график температурной зависимости магнитной восприимчивости имеет гиперболический вид.

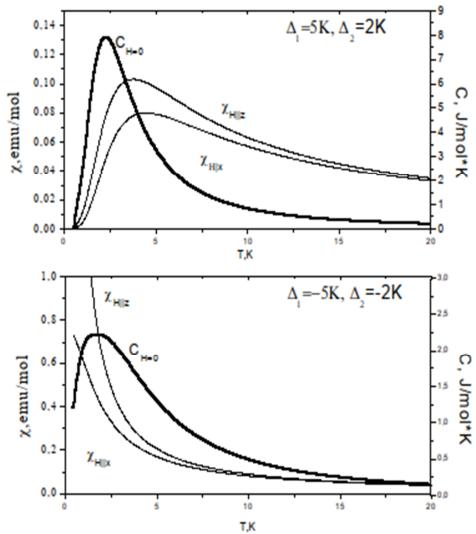


Рис.1. Температурная зависимость теплоемкости в отсутствие магнитного поля и магнитная восприимчивость при полях параллельных и перпендикулярных оси  $Z$ , при фиксированных параметрах  $\Delta_1, \Delta_2$  для двух случаев: сверху - синглетное основное состояние системы сегментов цепочки  $S=1$ ; снизу - триплетное основное состояние.

#### Анализ зависимостей намагниченности

Намагниченность при поле  $H \parallel Z$  выражается следующим образом:

$$M_{H \parallel Z} = n \frac{g m_B \left( e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 - g m_B H}{kT}} - e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 + g m_B H}{kT}} \right)}{1 + e^{-\frac{\Delta_1}{kT}} + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 - g m_B H}{kT}} + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 + g m_B H}{kT}}}$$

При поле  $H \parallel x$  температурная зависимость намагниченности выглядит так:

$$M = n \frac{g^2 m_B^2 H}{\sqrt{\left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^2 + g^2 m_B^2 H^2}} \left( e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{\left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^2 + g^2 m_B^2 H^2}}{kT}} - e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{\left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^2 + g^2 m_B^2 H^2}}{kT}} \right) \\ \frac{1 + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2}{kT}} + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 - \sqrt{\left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^2 + g^2 m_B^2 H^2}}{kT}} + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 + \sqrt{\left(\frac{\Delta_2}{2}\right)^2 + g^2 m_B^2 H^2}}{kT}}}{1 + e^{-\frac{\Delta_1}{kT}} + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 - g m_B H}{kT}} + e^{-\frac{\Delta_1 + \Delta_2 + g m_B H}{kT}}}$$

где  $x_1 = \frac{\Delta_1}{kT}, x_2 = \frac{\Delta_2}{kT}$ ,  $k$  – постоянная Больцмана,

$g = 2$ ,  $m_B$  – магнетон Бора,  $n$  – концентрация взаимодействующих пар спинов  $S=1/2$ .

На Рис.2 показаны зависимости намагниченности сегментов цепочки от поля при  $n=1$ . В случае основного триплетного состояния намагниченность выходит на насыщение при гораздо более слабых полях, чем в случае основного синглетного состояния. Также заметим, что с ростом температуры поле, при котором намагниченность выходит на насыщение, увеличивается. Это справедливо, как для синглетного основного состояния, так и для триплетного.

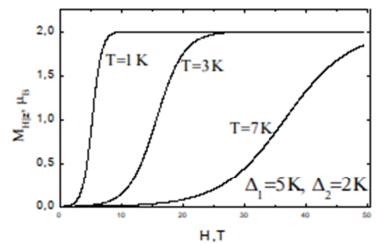


Рис.2. Зависимости намагниченности от поля, сверху – для поля, направленного вдоль оси  $Z$  для синглетного основного состояния сегментов цепочки, снизу – для поля, направленного перпендикулярно оси  $Z$  для триплетного основного состояния сегментов цепочки.

#### Заключение

Исследованы температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости сегментов халдейновской цепочки. Проанализировано изменение зависимостей теплоемкости и магнитной восприимчивости в зависимости от параметров системы, а также от того, какое состояние системы сегментов цепочки является основным. Также изучено, как изменяется поле насыщения системы в зависимости от температуры.

#### Список литературы:

1. Haldane F. D. M. Nonlinear field theory of large-spin Heisenberg antiferromagnets: semiclassically quantized solitons of the one-dimensional easy-axis Néel state //Physical Review Letters.- 1983.- v. 50.- №. 15.- p. 1153.-doi: 10.1103/PhysRevLett.50.1153
2. Affleck I., Kennedy T., Lieb E. H., and Tasaki H. Rigorous results on valence-bond ground states in antiferromagnets //Physical Review Letters. 1987. v. 59. №. 7. p. 799. doi:10.1103/PhysRevLett.59.799
3. Hagiwara M. et al. Observation of  $S=1/2$  degrees of freedom in an  $S=1$  linear-chain Heisenberg antiferromagnet //Physical Review Letters. 1990. v. 65. №. 25. p. 3181.
4. Das J. et al. Comparison of  $S=0$  and  $S=1/2$  impurities in the Haldane chain compound  $Y_2 BaNiO_5$  //Physical Review B. 2004. v. 69. №. 14. p. 144404.
5. Batista C. D., Hallberg K., Aligia A. A. Electron spin resonance of defects in the Haldane system  $Y_2 BaNiO_5$  //Physical Review B. 1999. v. 60. №. 18. p. R12553.
6. Tedoldi F., Santachiara R., Horvatić M. Y 89 NMR Imaging of the Staggered Magnetization in the Doped Haldane Chain  $Y_2 BaNi_{1-x} Mg_x O_5$  //Physical Review Letters. 1999. v. 83. №. 2. p. 412.
7. Darriet J., Regnault L. P. The compound  $Y_2 BaNiO_5$ : A new example of a Haldane gap in a  $S=1$  magnetic chain //Solid State Communications. 1993. v. 86. №. 7. p. 409-412.

|   |         |
|---|---------|
| <b>Омаров Б.А.</b>  | 312-313 |
| Разрушение полимерных материалов потоком атомарного кислорода   |         |
| <b>Яговцев В.О.</b>   | 314     |
| Элементы сверхпроводящей спинtronики  |         |
| <b>Титов П.А.</b>   | 315-316 |
| Исследование воспроизводимости управляющего сигнала пьезокерамикой  |         |
| <b>Терентьев А.В.</b>   | 317     |
| Исследование структуры и химического состава композитных пленок ПФМС  |         |
| <b>Прутков Г.В.</b>   | 318     |
| Исследование металлических магнитных сверхрешеток комплементарными методами   |         |
| <b>Кожухов М.В., Иконников Е.А.</b>   | 319     |
| Определение параметров схемотехнической модели SiGe ГБТ для различных значений мощности дозы радиационного излучения          |         |
| <b>Никифоров А.В.</b>   | 320-321 |
| Влияние разрывов цепочки на термодинамические свойства халдейновской цепочки  |         |
| <b>Миньков К.Н.</b>   | 322-323 |
| Возможность создания оптических диэлектрических микрорезонаторов методом термообработки посредством полупроводникового лазера |         |

#### **Секция 4. «Информационная безопасность»** 324-384

|  |         |
|--|---------|
| <b>Криштоп Д.В., Прокофьев А.О.</b>  | 324-325 |
| Разработка и реализация Honeypot-ловушки сетевой службы SSH  |         |
| <b>Матов Д.В., Прокофьев А.О.</b>  | 326-327 |
| Исследование уязвимостей UNIX-систем с помощью современных эксплойтов  |         |
| <b>Перевозчиков В.А., Прокофьев А.О., Шаймарданов Т.А.</b>   | 328-329 |
| Разработка и реализация метода обнаружения злоумышленника с использованием сетевого протокола FTP  |         |
| <b>Шумаков И.Ю., Троицкий С.С.</b>   | 330-331 |
| Повышение привлекательности Web-ловушки с применением технологии Honeypot  |         |
| <b>Смирнова Ю.С., Прокофьев А.О.</b> Исследование поведения злоумышленников при взаимодействии с RTSP-сервером                                     | 332-333 |
| <b>Егупов А.А., Аржаков А.В.</b>   | 334-335 |
| Разработка и реализация SSH Honeypot-ловушки   |         |
| <b>Атавина А.В., Аржаков А.В.</b>  | 336-337 |
| Анализ защищенности общедоступных Wi-Fi сетей на улицах Москвы   |         |
| <b>Нефёдов А.Н., Федорченко А.Ю.</b>   | 338-339 |
| Исследование и разработка способа обеспечения безопасного соединения и обмена данными в беспроводных сетях LTE для межмашинного взаимодействия D2D |         |
| <b>Сёмкина Н.С.</b>  | 340-341 |
| Виды и методы проведения внутреннего аудита системы управления информационной безопасностью  |         |
| <b>Завадская Е.Д., Антонова Е.К.</b>   | 342-343 |
| Стандарты и практики внутреннего аудита  |         |
| <b>Зарешин С.В.</b>  | 344-345 |
| Уязвимость Wi-Fi сетей иностранных посольств   |         |