

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**

*А.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 $PbNi_2V_2O_8$ [3], в органическом соединении NENP [4] и в Y_2BaNiO_5 при частичной замене ионов Ni^{2+} на немагнитные примеси Zn^{2+} и Mg^{2+} [5]-[7]. Гамильтониан для двух взаимодействующих спинов $S=1/2$ в такой системе имеет следующий вид:

$$\hat{H} = J(\hat{S}_1\hat{S}_2) + D\hat{S}_z^2 - gm_B\hat{S}_iH_i$$

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 Δ_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

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

где k - постоянная Больцмана, $g = 2$, m_B - магнетон Бора, n - концентрация взаимодействующих пар спинов $S=1/2$.

Если основным состоянием системы сегментов цепочки является синглет, то параметры Δ_1 и Δ_2 принимают положительное значение, если основное состояние - триплет, то значения указанных параметров отрицательны.

Когда система находится в синглетном основном состоянии, то при фиксированном Δ_1 максимум теплоемкости смещается в сторону более высоких температур при увеличении Δ_2 . При значениях $\Delta_2 > 10K$ на температурной зависимости теплоемкости появляется два максимума, один из которых не смещается при дальнейшем увеличении параметра Δ_2 . Если значение параметра Δ_2 фиксировано, то максимум теплоемкости смещается в сторону более высоких температур при увеличении Δ_1 . Отметим, что аналогичные тенденции наблюдаются при замене Δ_1 на $-\Delta_2$, и Δ_2 на $-\Delta_1$.

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

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

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

При поле H , направленном вдоль X или Y :

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

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 Δ_1, Δ_2 . При одинаковых параметрах Δ_1, Δ_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.

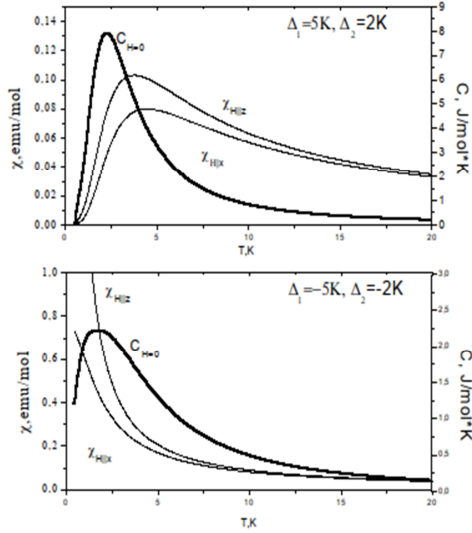


Рис.1. Температурная зависимость теплоемкости в отсутствие магнитного поля и магнитная восприимчивости при полях параллельных и перпендикулярных оси Z, при фиксированных параметрах Δ_1, Δ_2 для двух случаев: сверху - синглетное основное состояние системы сегментов цепочки $S=1$; снизу - триплетное основное состояние.

Анализ зависимостей намагниченности

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

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

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

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

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.

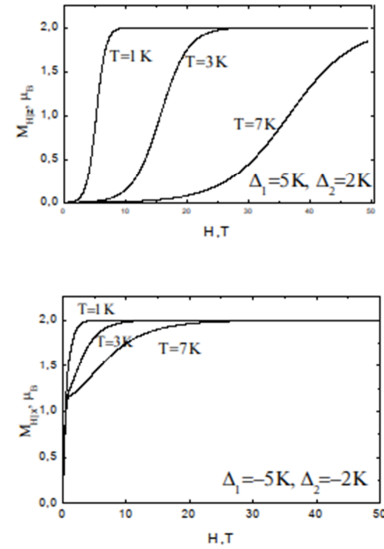


Рис.2. Зависимости намагниченности от поля, сверху – для поля, направленного вдоль оси Z для синглетного основного состояния сегментов цепочки, снизу – для поля, направленного перпендикулярно оси Z для триплетного основного состояния сегментов цепочки.

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:

- 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
- 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/PhysRev Lett. 59.799
- 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.
- 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.
- 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.
- Tedoldi F., Santachiara R., Horvatic 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.
- 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.

Омаров Б.А. Разрушение полимерных материалов потоком атомарного кислорода	312-313
Яговцев В.О. Элементы сверхпроводящей спинтроники	314
Титов П.А. Исследование воспроизводимости управляющего сигнала пьезокерамикой	315-316
Терентьев А.В. Исследование структуры и химического состава композитных пленок ПФМС	317
Пруцков Г.В. Исследование металлических магнитных сверхрешеток комплементарными методами	318
Кожухов М.В., Иконников Е.А. Определение параметров схемотехнической модели SiGe ГБТ для различных значений мощности дозы радиационного излучения	319
Никифоров А.В. Влияние разрывов цепочки на термодинамические свойства халдейновской цепочки	320-321
Миньков К.Н. Возможность создания оптических диэлектрических микрорезонаторов методом термообработки посредством полупроводникового лазера	322-323
<u>Секция 4. «Информационная безопасность»</u>	324-384
Криштоп Д.В., Прокофьев А.О. Разработка и реализация Honeypot-ловушки сетевой службы SSH	324-325
Матов Д.В., Прокофьев А.О. Исследование уязвимостей UNIX-систем с помощью современных эксплойтов	326-327
Перевозчиков В.А., Прокофьев А.О., Шаймарданов Т.А. Разработка и реализация метода обнаружения злоумышленника с использованием сетевого протокола FTP	328-329
Шумаков И.Ю., Троицкий С.С. Повышение привлекательности Web-ловушки с применением технологии Honeypot	330-331
Смирнова Ю.С., Прокофьев А.О. Исследование поведения злоумышленников при взаимодействии с RTSP-сервером	332-333
Егунов А.А., Аржаков А.В. Разработка и реализация SSH Honeypot-ловушки	334-335
Атавина А.В., Аржаков А.В. Анализ защищенности общедоступных Wi-Fi сетей на улицах Москвы	336-337
Нефёдов А.Н., Федорченко А.Ю. Исследование и разработка способа обеспечения безопасного соединения и обмена данными в беспроводных сетях LTE для межмашинного взаимодействия D2D	338-339
Сёмкина Н.С. Виды и методы проведения внутреннего аудита системы управления информационной безопасностью	340-341
Завадская Е.Д., Антонова Е.К. Стандарты и практики внутреннего аудита	342-343
Зарешин С.В. Уязвимость Wi-Fi сетей иностранных посольств	344-345