

**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.

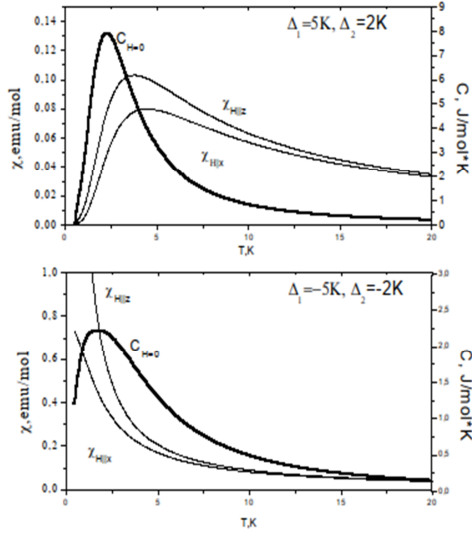


Рис.1. Температурная зависимость теплоемкости в отсутствие магнитного поля и магнитная восприимчивости при полях параллельных и перпендикулярных оси Z, при фиксированных параметрах Δ_1, Δ_2 для двух случаев: сверху - синглетное основное состояние системы сегментов цепочки $S=1$; снизу - триплетное основное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

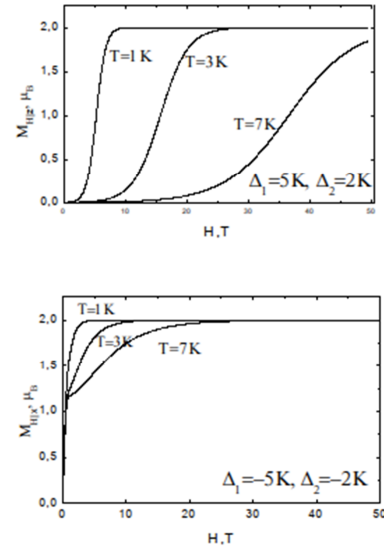


Рис.2. Зависимости намагниченности от поля, сверху – для поля, направленного вдоль оси Z для синглетного основного состояния сегментов цепочки, снизу – для поля, направленного перпендикулярно оси Z для триплетного основного состояния сегментов цепочки.

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:

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/PhysRev Lett. 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., 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.
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.