



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

## *Отчет поработе в НУЛ «Квантовая nanoэлектроника»*

*Тема: «Анализ литературных данных по расчету  
вклада редкоземельной подсистемы в  
теплоемкость, магнитную восприимчивость,  
намагниченность.»*

Студент: Попов Юрий СКБ-171

Научный руководитель: Попова Елена Арнольдовна»

# Однородные цепочки с полуцелочисленным и целочисленным спином

## Однородные цепочки с полуцичисленным спином

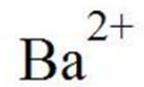
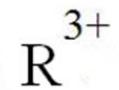
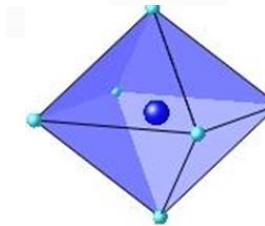
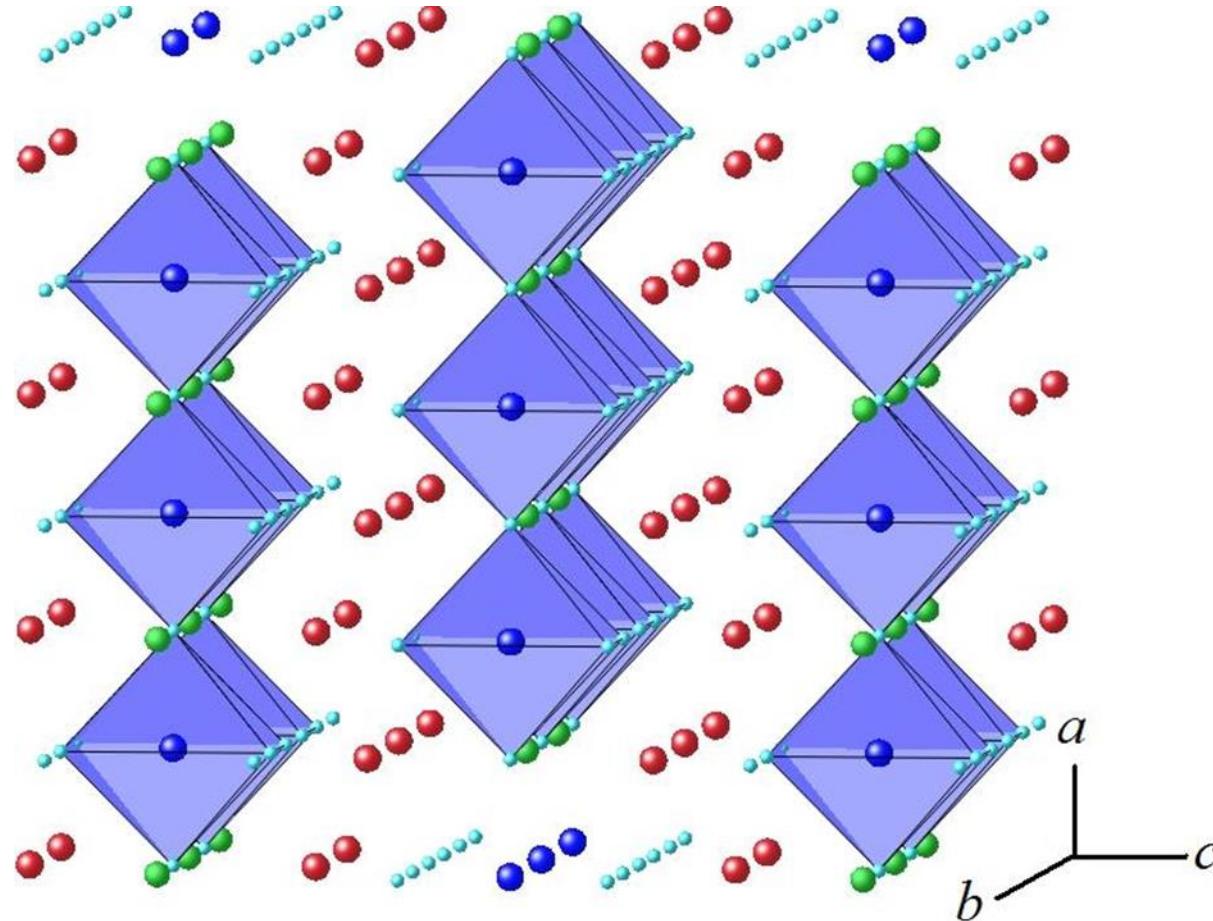
- Основное состояние неупорядоченно  $\langle S_i^z \rangle = 0$
- Спин-спиновые корреляции антиферромагнитны и затухают степенным образом  
$$\langle S_i^z S_{i+k}^z \rangle \propto (-1)^k/k$$
- Длина корреляции бесконечна

## Халдейновские цепочки

- Цепочки спинов  $S = 1$
- Неупорядоченное основное состояние
- Спектр возбуждений с энергетической щелью  $\Delta = 0.41 \text{ J}$
- Проекции  $S_z = -1, S_z = 0, S_z = +1$
- Длина спиновых корреляций 7a

$| \dots \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \mathbf{0} \uparrow \downarrow \uparrow \mathbf{0} \uparrow \downarrow \uparrow \downarrow \dots \rangle$

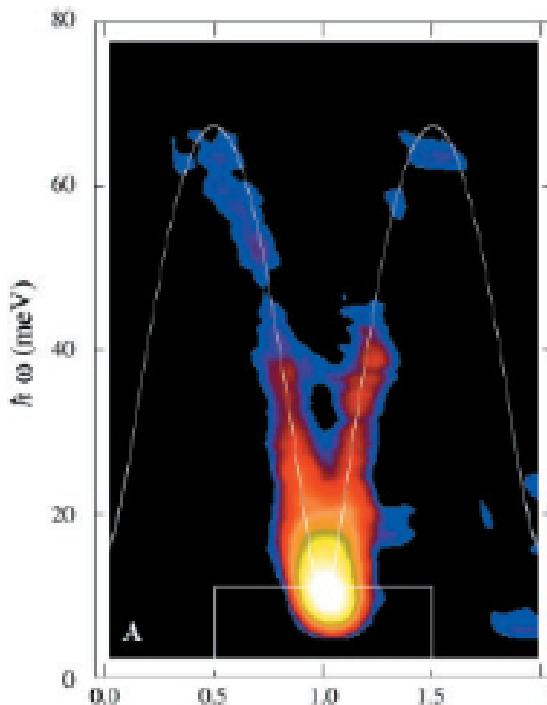
# Кристаллическая структура $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$



$Ni^{2+}$  -  $S=1$

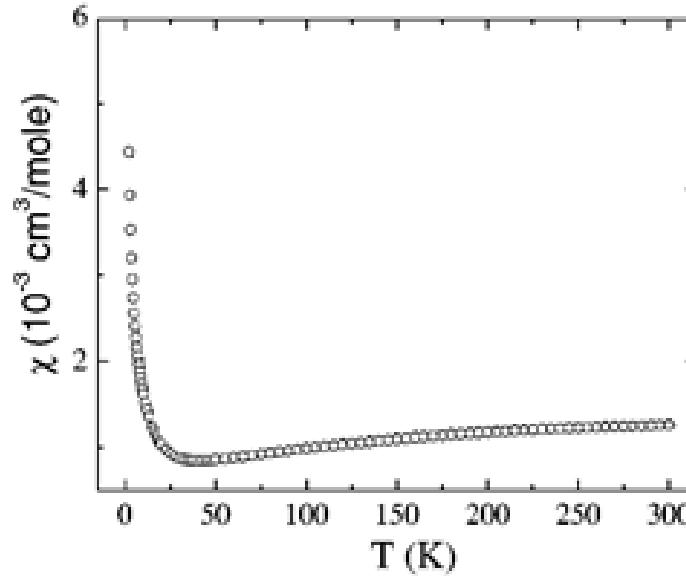
$Nd^{3+}$  -  $S=3/2, L=6, J=9/2$

# Халдейновская щель $Y_2BaNiO_5$



Guangyong Xu, G. Aeppli, M.E. Bisher, C. Broholm,  
JFDiTusa, C.D. Frost, H.Ito, K.Oka, R.L. Paul, H.Takagi,  
M.M.J.Treacy, Science 289, 419 (2000)

$Y_2BaNiO_5$



I.Das, A.V.Mahajan, I.Bobroff, H.Alloul, F.Alet,  
E.S.Sørensen,

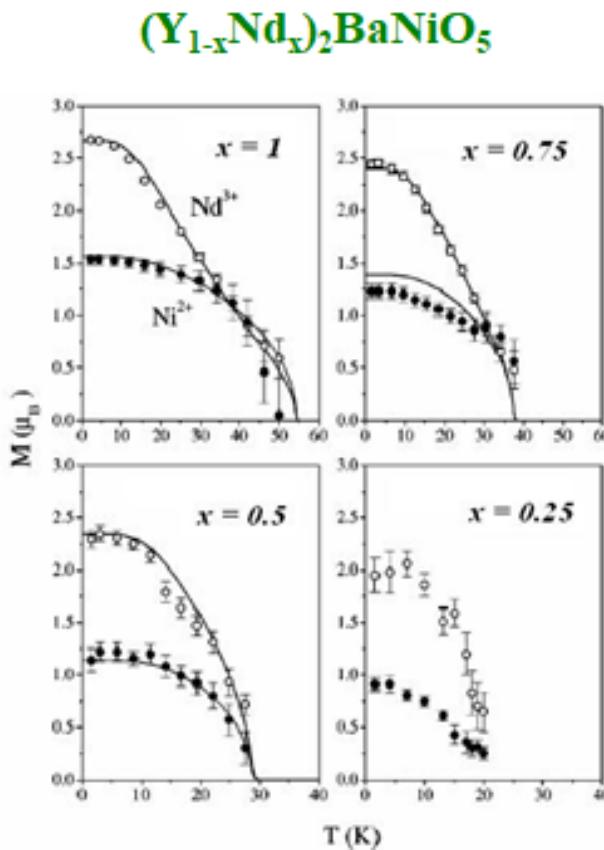
Phys. Rev. B 69, 144404 (2004)

не упорядочивается вплоть до  $T = 0.1$  К, спиновая щель  $\Delta \approx 100$  К

длина корреляции внутри цепочки  $\xi \approx 7a$ .

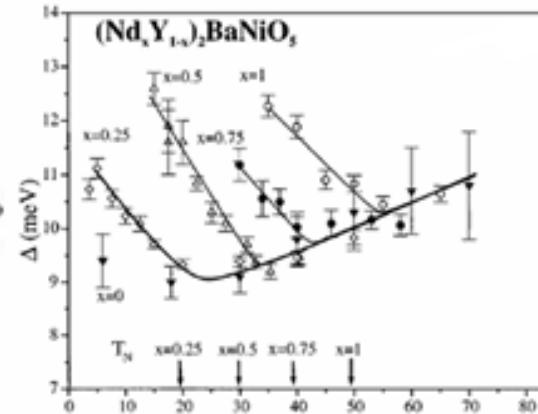
# $(Y_{1-x}Nd_x)_2BaNiO_5$ .

## Упругое и неупругое рассеяние нейтронов



$R_2BaNiO_5$   
возникает антиферромагнитное  
упорядочение

при  $T < T_N$  существует  
халдэйновской фазы и  
антиферромагнитного состояния

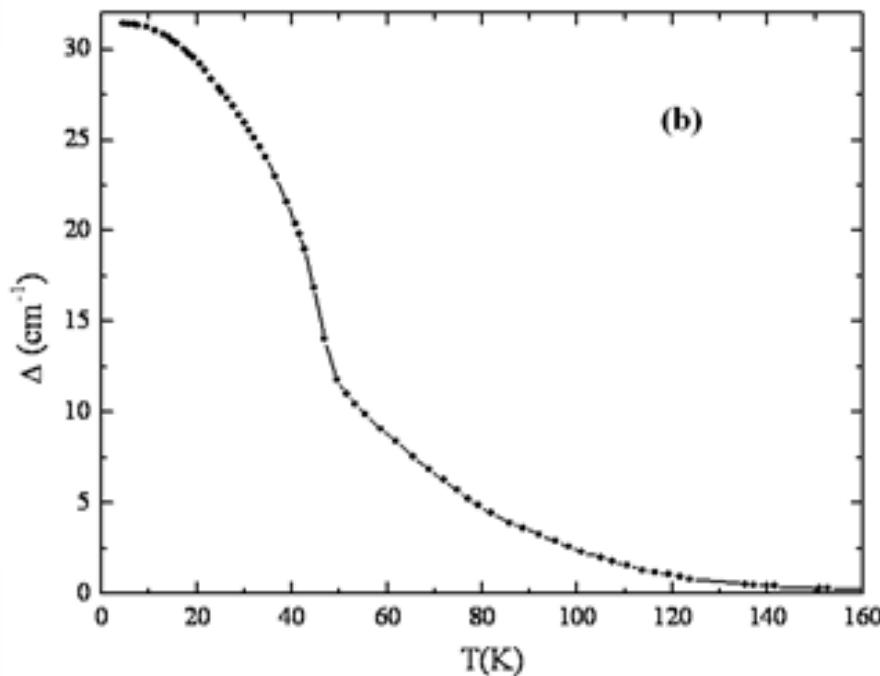
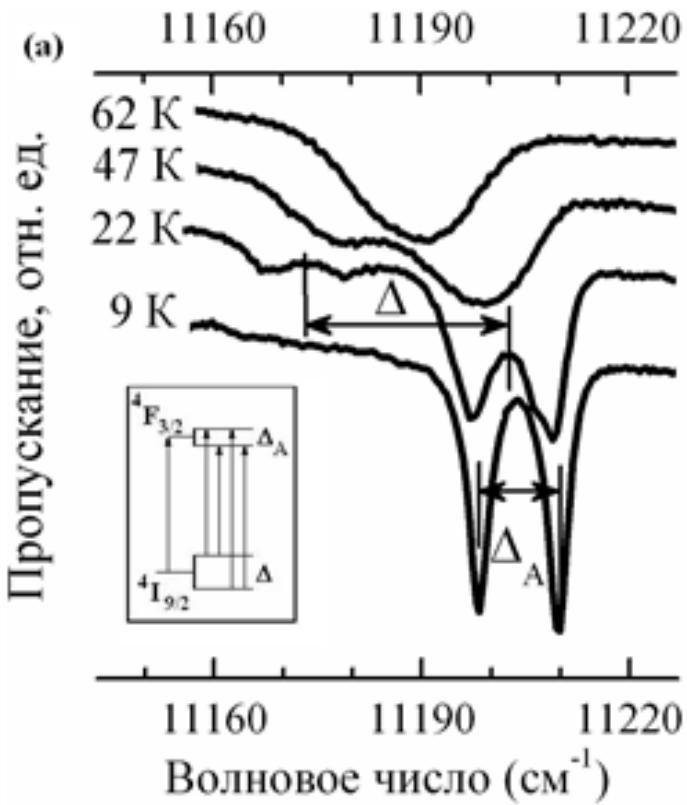


T. Yokoo, S.A. Raymond, A. Zheludev, S. Maslov, E. Ressouche, I. Zaliznyak, R. Erwin, M. Nakamura, J. Akimitsu, Phys. Rev. B **58** 14424 (1998).

Магнитные моменты иона Nd<sup>3+</sup> ориентированы вдоль оси с кристалла,

Магнитные моменты иона Ni<sup>2+</sup> лежат в плоскости *ac*

Спектр пропускания поликристаллического образца  $\text{Nd}_2\text{BaNiO}_5$  в области перехода  ${}^4\text{I}_{9/2} \rightarrow {}^4\text{F}_{3/2}$  в ионе  $\text{Nd}^{3+}$  при различных температурах. Температурная зависимость расщепления основного состояния иона  $\text{Nd}^{3+}$  в  $\text{Nd}_2\text{BaNiO}_5$ .



# Вклад неодимовой подсистемы в теплоемкость, магнитную восприимчивость и намагниченность

$$C = 2R \left( \frac{\Delta}{kT} \right)^2 \frac{\exp(\Delta/kT)}{(1 + \exp(\Delta/kT))^2},$$

$$\begin{cases} B_{\text{eff } 1\alpha} = B_\alpha + \kappa_{11\alpha} M_{1\alpha}^{Nd} + \kappa_{12\alpha} M_{2\alpha}^{Nd} + B_{\text{ex } \alpha}^{Nd}, \\ B_{\text{eff } 2\alpha} = B_\alpha + \kappa_{11\alpha} M_{2\alpha}^{Nd} + \kappa_{12\alpha} M_{1\alpha}^{Nd} - B_{\text{ex } \alpha}^{Nd}, \end{cases}$$

$B$  - внешнее магнитное поле параллельно одной из кристаллографических осей  $\alpha=a, b, c$ ;

$M_{1\alpha}^{Nd}$  и  $M_{2\alpha}^{Nd}$  - компоненты магнитных моментов неодима 1-ой и 2-ой подрешетки.

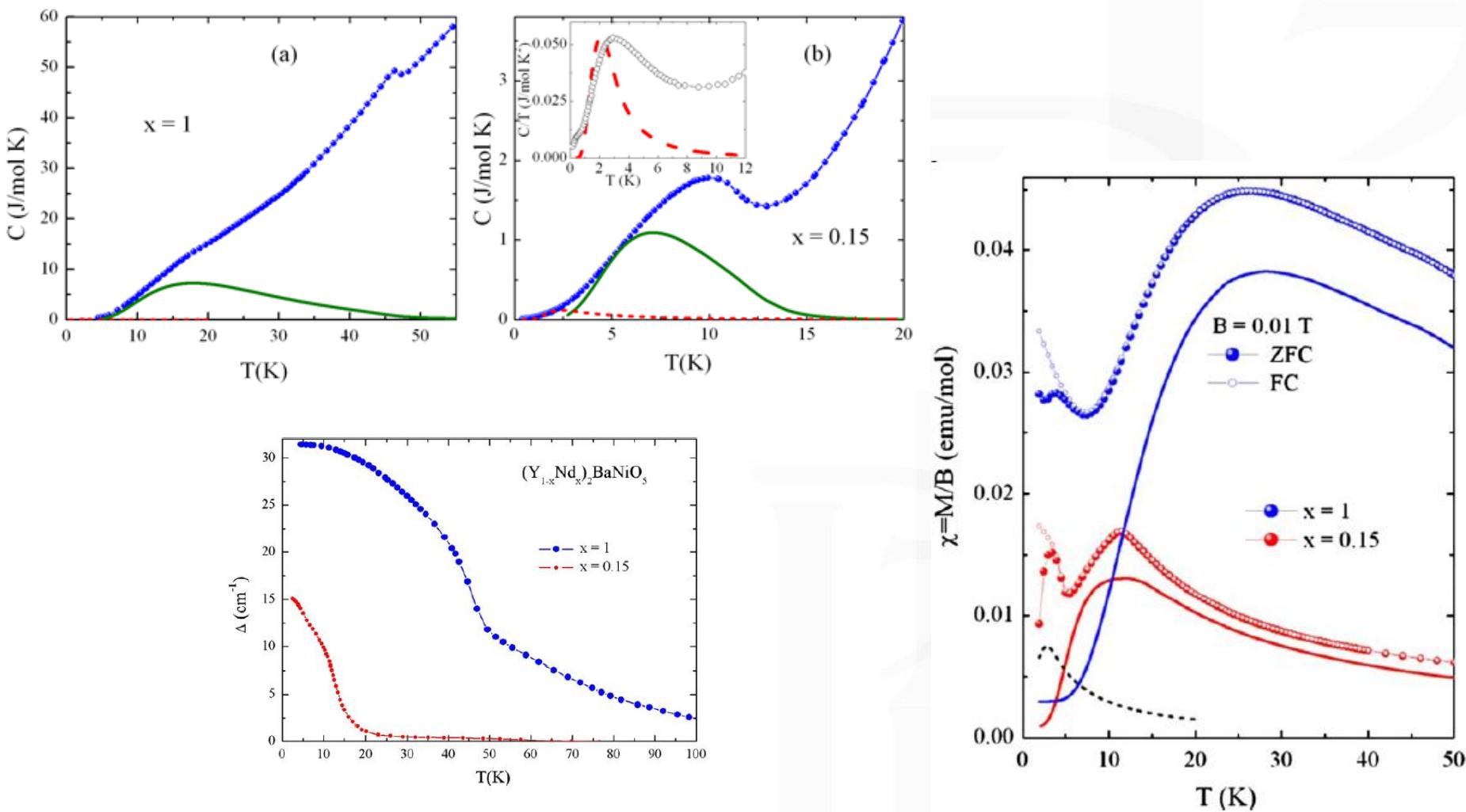
Параметр  $\kappa_{11}$  описывает обменное взаимодействие между магнитными моментами, имеющими одинаковую ориентацию,

Параметр  $\kappa_{12}$  описывает обменное взаимодействие между магнитными моментами, имеющих противоположную ориентацию.

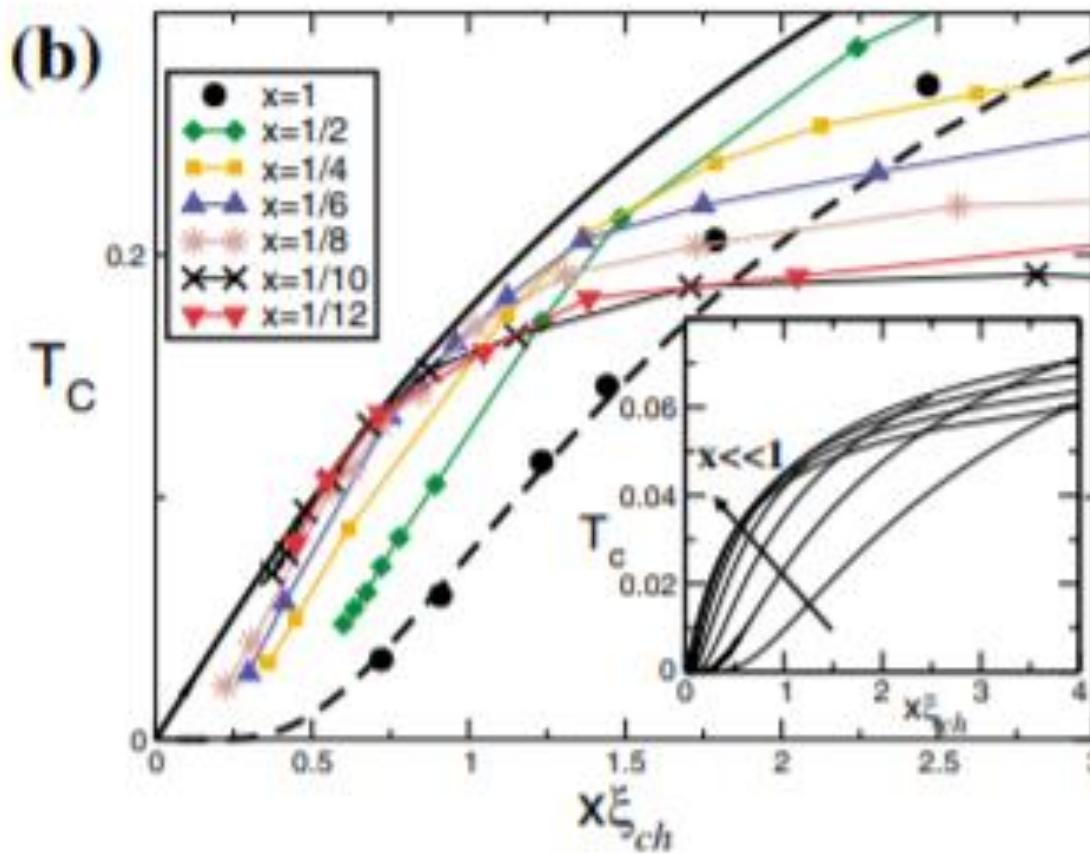
$$E = \pm \frac{1}{2} \Delta_{1,2},$$

$$\Delta_{1,2} = \mu_B \sqrt{g_a^2 B_{\text{eff } 1,2a}^2 + g_b^2 B_{\text{eff } 1,2b}^2 + g_c^2 B_{\text{eff } 1,2c}^2}$$

# Вклад неодимовой подсистемы в теплоемкость и магнитную восприимчивость



# Зависимость температуры антиферромагнитного упорядочения $T_N$ от концентрации ионов $Nd^{3+}$ и длины корреляции $\xi$ никелевой цепочки



# Выводы

- В халдейновских цепочках, реализуется неупорядоченное основное состояние со спиновой щелью в спектре магнитных возбуждений
  - Исходя из особенностей кристаллической структуры, можно говорить не только о сильном антиферромагнитном взаимодействии между ионами никеля вдоль цепочки, но о взаимодействии между ионами Nd, осуществляемом через никелевую цепочку
  - Аномалия Шоттки (широкий максимум) на температурной зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости обусловлена изменением заселенности подуровней основного крамерсовского дублета иона Nd<sup>3+</sup>

# Выводы

- Полная или частичная замена иона  $Y^{3+}$  на редкоземельный магнитный ион  $R^{3+}$  приводит к антиферромагнитному упорядочению
  - $Y_2BaNiO_5$  остается неупорядоченным по крайней мере вплоть до 0,1 К
  - Никелевая подсистема остается внутренне разупорядоченной как в парамагнитной области, так и в области низких температур.
  - Упорядочение происходит в системе неодима.



НАЦИОНАЛЬНЫЙ ИССЛЕДОВАТЕЛЬСКИЙ  
УНИВЕРСИТЕТ

Спасибо  
за внимание!

# Литература

1. M. Haldane F.D., Phys. Rev. Lett 50,1153(1983).[
2. Regnault L.P., Zaliznyak I., Renard J.P., and Vettier C., Phys. Rev. B 50, 9174 (1994)
3. Buyers J.L., Morra R.M., Armstrong R.L., Hogan M.J., Gerlach P., and Hirakawa K., Phys. Rev.Lett. 56, 371(1986)
4. K. Kojima, A. Keren, L. P. Le, G. M. Luke, B. Nachumi, W. D. Wu, Y. J. Uemura, K. Kiyono, S. Miyasaka, H. Takagi, and S. Uchida, Phys. Rev. Lett. 74, 3471 (1995).
5. J. Darriet, L.P. Regnault, Solid State Commun. 86, 409 (1993).
6. 6. G.Xu, G.Aeppli, M.E.Bisher, C.Broholm, J.F.DiTusa, C.D.Frost, T.Ito, K.Oka, R.L.Paul, H.Takagi, M.M.J.Treacy, Science 289, 419 (2000).
7. J.Das, A.V.Mahajan, J.Bobroff, H.Alloul, F.Alet, E.S.Sørensen, Phys. Rev. B 69, 144404 (2004).
8. **T. Yokoo, S.A. Raymond, A. Zheludev, S. Maslov, E. Ressouche, I. Zaliznyak, R. Erwin, M. Nakamura, J. Akimitsu, Phys. Rev. B 58 14424 (1998).**
9. **E. A. Popova, A. N. Vasil'ev, S. A. Klimin, M. V. Narozhnyi, and M. N. Popova, JETP 111, 204 (2010).**
10. G.G.Chepurko, Z.A.Kazei, D.A.Kudrjavtsev, R.Z.Levitin, B.V.Mill, M.N.Popova, V.V.Snegirev, Phys. Lett. A 157, 81 (1991).
11. E. Garcíá-Matres, J.L. García-Muñoz, J.L. Martínez, J. Rodríguez-Carvajal, J. Magn. Magn. Mater. 149, 363 (1995).
12. **A. Zheludev, J.M. Tranquada, T. Vogt, D.J. Buttrey, Europhys. Lett. 35, 385 (1996).**
13. V. Sachan, D. J. Buttrey, J. M. Tranquada, and G. Shirane, Phys. Rev. B 49, 9658 (1994).].
14. **M.N. Popova, S.A. Klimin, E.P. Chukalina, E.A. Romanov, B.Z. Malkin, E. Antic-Fidancev, B.V. Mill, and G. Dhalenne, Phys. Rev. B, 71, 024414 (2005).**
15. **M. N. Popova, S. A. Klimin, E. P. Chukalina, B. Z. Malkin, R. Z. Levitin, B. V. Mill and E. Antic-Fidancev, Phys. Rev. B 68, 155103 (2003).**
16. J. V. Alvarez, Roser Valentí, and A. Zheludev, Phys. Rev. B, **65**,184417 (2002).