

**ВЛИЯНИЕ СПИНА ВЗАИМОДЕЙСТВУЮЩИХ
ФЕРРОНОВ НА ТЕМПЕРАТУРНУЮ
ЗАВИСИМОСТЬ ТЕПЛОЕМКОСТИ И МАГНИТНОЙ
ВОСПРИИМЧИВОСТИ В ХОЛДЕЙНОВСКОМ
МАГНЕТИКЕ**

С.И. Гаварина, Ю.Л. Попов

*Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»,
департамент компьютерной инженерии
МИЭМ НИУ ВШЭ*

Аннотация

В работе были исследованы влияние спина двух взаимодействующих ферронов на температурную зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости в холдейновской магнитной системе с спином $S=1$.

Введение

В одномерных магнитных соединениях особую роль играют соединения с целочисленным спином. В этих соединениях возбужденные состояния отделены от основного немагнитного состояния спиновой щелью. Примером низкоразмерного магнитного соединения является Y_2BaNiO_5 . Кристаллическое поле приводит к расщеплению 10-кратно вырожденного уровня свободного иона Ni^{2+} , в результате которого на орбиталях $3d_{3z^2-r^2}$ и $3d_{x^2-y^2}$ находится по одному электрону. Согласно правилу Хунда, спины этих электронов сонаправлены, и полный спин иона Ni^{2+} равен $S=1$. Вдоль цепочки ионы Ni^{2+} взаимодействуют друг с другом через $2p_z$ орбиталь иона кислорода. В чистом Y_2BaNiO_5 на $2p_z$ орбитали иона O^{2+} находится два электрона, это приводит к антиферромагнитному взаимодействию между двумя ближайшими ионами Ni^{2+} . Если на апикальном кислороде не хватает одного электрона, то на этом ионе кислорода возникает дырка с эффективным спином $S=1/2$. Дырка со спином $S=1/2$ с $2p_z$ орбитали O перепрыгивает на место дырки на d_{z^2} орбиталь Ni (без переворота спина). На освободившее место иона кислорода происходит перескок дырки с другого Ni . Этот виртуальный обмен дырками приводит к ферромагнитному взаимодействию между двумя ближайшими ионами Ni . Возникает кластер со спином $S=3/2$ — феррон [1]. Предполагается, что размер феррона, а соответственно, и спин феррона может изменяться под действием магнитного поля. Поэтому в настоящей работе исследовано влияние взаимодействия ферронов со спинами $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$ на температурную зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости.

Анализ энергетического спектра двух взаимодействующих ферронов

Гамильтониан для двух взаимодействующих ферронов можно представить в виде [2]:

$$\hat{H} = 2J(\hat{S}_1\hat{S}_2) - \mu_B g H_i \hat{S}_i$$

где J – константа обменного взаимодействия ферронов со спинами S_1 и S_2 , второе слагаемое – зеемановская энергия во внешнем магнитном поле H_i , \hat{S}_i – компонента полного спина системы вдоль оси i ($i = x, y, z$). μ_B – магнетон Бора, g – фактор для иона Ni^{2+} принят равным $g=2$.

Уравнение Шредингера для определения уровней энергии имеет вид:

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

Для решения этого уравнения и в последующих расчетах была использована программа Wolfram Mathematica.

В ходе решения уравнения Шредингера для случая $H||z$ были получены энергетические уровни системы двух взаимодействующих ферронов со спинами $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$. Полученные значения энергии, например, для двух взаимодействующих ферронов со спинами $S_1 = S_2 = 5/2$, имеют вид:

$$E=0;$$

$$E = \Delta \pm ng\mu_B H; (n = 0, 1)$$

$$E = 3\Delta \pm ng\mu_B H; (n = 0, 1, 2)$$

$$E = 6\Delta \pm ng\mu_B H; (n = 0, 1, 2, 3)$$

$$E = 10\Delta \pm ng\mu_B H; (n = 0, 1, 2, 3, 4)$$

$$E = 15\Delta \pm ng\mu_B H; (n = 0, 1, 2, 3, 4, 5);$$

где, $\Delta=2J$ – расстояние между синглетом и триплетом в отсутствие поля.

Аналогично были получены энергетические уровни для двух других типов взаимодействующих ферронов со спинами $S=3/2$ и $S=7/2$.

Анализ температурной зависимости теплоемкости

Перераспределение электронов по расщепленным энергетическим уровням приводит к появлению аномалии Шоттки (широкого максимума) [3] на теплоемкости и максимума на магнитной восприимчивости.

Теплоемкость системы определяется выражением:

$$C = R \frac{\partial}{\partial T} \left(T^2 \frac{\partial \ln z}{\partial T} \right)$$

где $z = \sum_i e^{-\frac{E_i}{kT}}$ – статистический вес системы, k – постоянная Больцмана. Например, для двух взаимодействующих ферронов со спинами $S_1 = S_2 = 3/2$ в отсутствие магнитного поля ($H=0$) статистический вес системы имеет вид:

$$z = 1 + 3e^{-\frac{\Delta}{kT}} + 5e^{-\frac{3\Delta}{kT}} + 7e^{-\frac{6\Delta}{kT}}$$

Аналогичные выражения записаны для системы со спинами $S=5/2$, $S=7/2$.

На рисунке 1 представлены температурные зависимости теплоемкости двух взаимодействующих ферронов со спинами $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$.

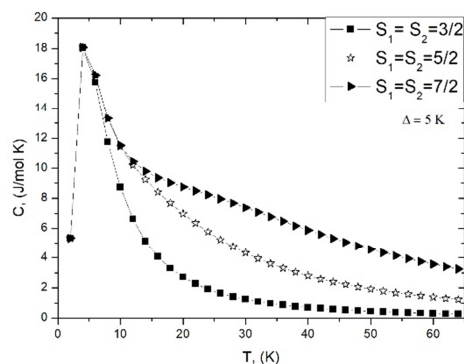


Рис. 1. Температурная зависимость теплоемкости для двух взаимодействующих спинов $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$ в отсутствие магнитного поля, при фиксированном параметре $\Delta=5$ K.

Расчеты показали, что при увеличении спина ферронов максимум слегка смещается в сторону более высоких температур.

температур. Кроме того, с увеличением S меняется характер зависимости $\chi(T)$: выше 10K значение теплоемкости для системы с $S=7/2$ значительно больше, чем в случае $S=3/2$. Было обнаружено, что для каждой из трех систем со спинами $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$ максимум теплоемкости смещается в сторону более высоких температур, если увеличивать значение параметра Δ . В случае изменения знака Δ на противоположный, результат остается тем же.

Анализ температурной зависимости магнитной восприимчивости

Магнитная восприимчивость для двух взаимодействующих ферронов со спинами $S=3/2$ равна:

$$\chi = \frac{2 \left(14 + 5e^{\frac{3\Delta}{kT}} + e^{\frac{5\Delta}{kT}} \right) g^2 \mu^2}{\left(7 + 5e^{\frac{3\Delta}{kT}} + 3e^{\frac{5\Delta}{kT}} + e^{\frac{6\Delta}{kT}} \right) kT}$$

Для системы со спинами $S=5/2$:

$$\chi = \frac{2 \left(55 + 30e^{\frac{5\Delta}{kT}} + 14e^{\frac{9\Delta}{kT}} + 5e^{\frac{12\Delta}{kT}} + e^{\frac{14\Delta}{kT}} \right) g^2 \mu^2}{\left(11 + 9e^{\frac{5\Delta}{kT}} + 7e^{\frac{9\Delta}{kT}} + 5e^{\frac{12\Delta}{kT}} + 3e^{\frac{14\Delta}{kT}} + e^{\frac{15\Delta}{kT}} \right) kT}$$

Для спинов $S=7/2$:

$$\chi = \frac{2 \left(140 + 91e^{\frac{7\Delta}{kT}} + 55e^{\frac{13\Delta}{kT}} + 30e^{\frac{18\Delta}{kT}} + 14e^{\frac{22\Delta}{kT}} + 5e^{\frac{25\Delta}{kT}} + e^{\frac{27\Delta}{kT}} \right) g^2 \mu^2}{\left(15 + 13e^{\frac{7\Delta}{kT}} + 11e^{\frac{13\Delta}{kT}} + 9e^{\frac{18\Delta}{kT}} + 7e^{\frac{22\Delta}{kT}} + 5e^{\frac{25\Delta}{kT}} + 3e^{\frac{27\Delta}{kT}} + e^{\frac{28\Delta}{kT}} \right) kT}$$

На рисунке 2 представлены температурные зависимости магнитной восприимчивости двух взаимодействующих ферронов со спинами $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$, построенные по указанным формулам.

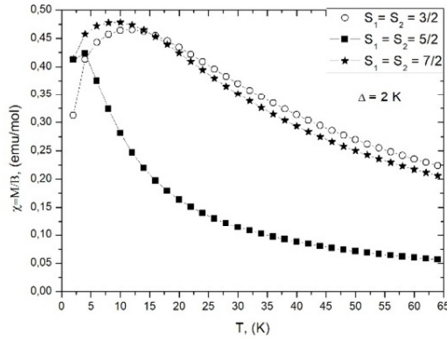


Рис.2. Температурная зависимость магнитной восприимчивости для двух взаимодействующих спинов $S=3/2$, $S=5/2$, $S=7/2$.

На всех представленных зависимостях $\chi(T)$ виден максимум, положение которого зависит от спинов взаимодействующих ферронов. Было получено, что при увеличении Δ величина магнитной восприимчивости уменьшается, причем максимум слегка сдвигается в сторону более высоких температур. При изменении знака Δ , что означает взаимодействие между ферронами носит ферромагнитный характер, график магнитной восприимчивости от температуры имеет вид гиперболы.

Заключение

Исследовано влияние спина взаимодействующих ферронов на температурную зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости в низкоразмерной магнитной системе со спином $S=1$. Показано, что при изменении спина феррона характер температурных зависимостей теплоемкости и магнитной восприимчивости слегка меняется, но основные особенности – максимумы на зависимостях $C(T)$ и $\chi(T)$ – остаются.

Благодарность

Статья подготовлена в ходе проведения исследования (№ 19-04-030) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета „Высшая школа экономики“ в 2018 — 2019 гг.

Список литературы:

1. Indrani Bose and Emily Chattopadhyay. Incommensurate structure factor in a hole-doped spin-1 system. International Journal of Modern Physics B, Vol. 15, Nos. 19 & 20 (2001) 2535–2548
2. E. Janod, C. Payen, F.-X. Lannuzel, and K. Schoumacker. Random interactions and spin-glass thermodynamic transition in the hole-doped Haldane system $Y_{2-x}Ca_xBaNiO_5$. Physical Review B, volume 63, 212406. DOI: 10.1103/PhysRevB.63.212406.
3. Guangyong Xu, G. Aeppli, M. E. Bisher. Holes in a Quantum Spin Liquid. Science Vol 289. 21 July 2000.

ОБ АСИМПТОТИКЕ СПЕКТРА ДВУМЕРНОЙ КВАНТОВОЙ ТОЧКИ С КУЛОНОВСКИМ ПОТЕНЦИАЛОМ САМОДЕЙСТВИЯ ВБЛИЗИ НИЖНИХ ГРАНИЦ СПЕКТРАЛЬНЫХ КЛАСТЕРОВ

Д.А. Вахрамеева

Национальный исследовательский университет
«Высшая школа экономики»,
департамент прикладной математики
МИЭМ НИУ ВШЭ

Аннотация

Рассматривается задача на собственные значения для оператора типа Хартри с кулоновским потенциалом самодействия. Найдены асимптотические собственные значения и асимптотические собственные функции вблизи нижних границ спектральных кластеров.

Введение

В работе рассмотрена задача на собственные значения для нелинейного оператора типа Хартри с кулоновским потенциалом самодействия $|q - q'|^{-1}$ в пространстве $L^2(\mathbb{R}^2)$

$$(H - \varepsilon \int_{\mathbb{R}^2} \frac{1}{|q - q'|} |\psi(q)|^2 dq') \psi = \lambda \psi, \quad (1)$$

$$\|\psi\|_{L^2(\mathbb{R}^2)} = 1, \quad (2)$$

Здесь

$$H = -\frac{1}{2} \left(\frac{\partial^2}{\partial q_1^2} + \frac{\partial^2}{\partial q_2^2} \right) + \frac{q_1^2 + q_2^2}{2}$$

– двумерный осциллятор, $\varepsilon > 0$ – малый параметр.

Задача (1), (2) относится к классу резонансных, поскольку обе частоты осциллятора равны 1. Кроме того, потенциал самодействия в (1) имеет особенность. Отметим, что уравнения самосогласованного поля типа Хартри играют важную роль в квантовой теории [1] и нелинейной оптике [2].

Рассматриваемая задача связана с квантовыми точками, которые являются ловушками электронов. Квантовые точки представляют большой интерес, например, в реализации кубитов в квантовом компьютере. На электрон действует сила притяжения к центру ловушки, как в гармоническом осцилляторе. Также имеется взаимодействие с внешним окружением ловушки. Сила взаимодействия с внешним окружением ловушки зависит от пространственного распределения состояния электрона. Такую силу можно рассматривать как самодействие электрона на себя. Подобные системы с самодействием в квантовой механике описываются уравнениями самосогласованного поля типа