

Рис.5. Средняя энергия для двух последовательностей при изменении температуры

Теплоемкость находится как второй момент энергии: $C = \frac{\epsilon}{kT^2} (\langle E^2 \rangle - \langle E \rangle^2)$

На рисунке 6 показана зависимость теплоёмкости от температуры для некоторых последовательностей.

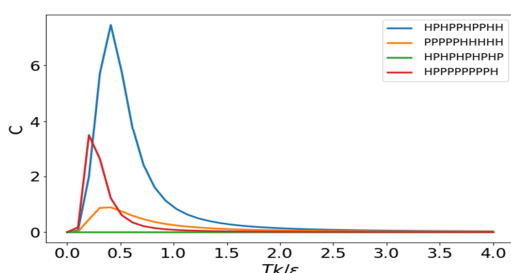


Рис.6. Теплоёмкость при изменении температуры для некоторых последовательностей последовательностей

Заклучение
В ходе работы было рассмотрено пространство конформаций, средние физические величины для последовательности и их связь с фолдингом. В работе приведены примеры для коротких цепочек, рассматривались последовательности до длины 11.

Данная работа — всего лишь начало исследования, посвящённого моделированию фолдинга белка.

Работа выполнена в рамках гранта РФФИ 19-07-01117.

Список литературы:

1. Ken A. Dill, A Lattice Statistical Mechanics Model of the Conformational and Sequence Spaces of Proteins / Kit Fun Lau, Ken A. Dill // *Macromolecules J.* – 1989 – Vol 22 – P. 3986-3997 .
2. Iwao Teraoka, Polymer solutions / Iwao Teraoka // John Wiley & Sons – 2002 – Vol 1 – P. 1-66.
3. Carlo Vanderzande, Lattice Models of Polymers / Carlo Vanderzande// Cambridge University Press – 2008– Vol 3 – P. 38-61, Vol 8 — P 119-148.

ВЛИЯНИЕ ФЕРРОНОВ СО СПИНОМ $S=3/2$ НА ТЕРМОДИНАМИЧЕСКИЕ ХАРАКТЕРИСТИКИ ОДНОМЕРНЫХ ЦЕПОЧЕК СО СПИНОМ $S=1$

Р.Г. Астраханцев, Т.В. Бень

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

Аннотация

В работе была изучена зависимость теплоемкости и магнитной восприимчивости от параметра взаимодействия между двумя ферронами со спинами $3/2$.

Введение

В кристаллах, содержащих в своей структуре халдейновские цепочки с $S=1$, образуется неупорядоченное основное состояние со щелью в спектре магнитных возбуждений [1]. Основное состояние таких систем представляет собой устойчивую простую валентную связь. Согласно модели VBS, 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 на ионе кислорода образуется дырка с эффективным спином $S=1/2$, то виртуальный обмен дырками приводит к ферромагнитному взаимодействию между двумя ближайшими магнитными ионами, в результате чего возникает кластер со спином $S = 3/2$ — феррон [2].

Внесение данной примеси в исследуемую халдейновскую систему приводит к появлению аномалии Шоттки на температурной зависимости теплоёмкости [3] (широкого максимума), которая смещается в сторону высоких температур с увеличением магнитного поля. Это смещение изотропно, т.е. практически не зависит от направления приложенного магнитного поля. Данная аномалия появляется вследствие перераспределения электронов с изменением температуры по уровням энергетического спектра. Была так же замечена некоторая зависимость величины магнитной восприимчивости от концентрации примесей Ca^{2+} в соединении Y_2BaNiO_5 : при увеличении концентрации в области низких температур восприимчивость возрастает, и при достаточно большой концентрации уходит в насыщение [4].

Анализ энергетического спектра двух ферронов

Гамильтониан для двух взаимодействующих ферронов со спинами $S_1=S_2=3/2$ имеет следующий вид [4]:

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

где J – константа обменного взаимодействия спинов $S=3/2$, второе слагаемое – энергия Зеемана во внешнем магнитном поле H , i – одна из осей x, y, z , \hat{S}_i – компонента полного спина системы вдоль соответствующей осей.

Уравнение Шредингера для определения уровней энергии имеет вид:

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

Для получения энергетических уровней была использована среда Wolfram Mathematica. Найдены следующие значения:

$$\begin{aligned} E_1 &= 0, E_2 = \Delta - g\mu_B H, E_3 = \Delta, E_4 = \Delta + g\mu_B H, \\ E_5 &= 3\Delta - 2g\mu_B H, E_6 = 3\Delta - g\mu_B H, E_7 = 3\Delta, \\ E_8 &= 3\Delta + g\mu_B H, E_9 = 3\Delta + 2g\mu_B H, E_{10} = 6\Delta - 3g\mu_B H, \\ E_{11} &= 6\Delta - 2g\mu_B H, E_{12} = 6\Delta - g\mu_B H, E_{13} = 6\Delta, \\ E_{14} &= 6\Delta + g\mu_B H, E_{15} = 6\Delta + 2g\mu_B H, E_{16} = 6\Delta + 3g\mu_B H, \end{aligned}$$

где $g = 2, \mu_B$ – магнетон Бора, $\Delta=2J$ – состояние между синглетом и триплетом в отсутствии поля.

Анализ зависимостей магнитной восприимчивости и теплоемкости

Температурная зависимость теплоемкости, которая представляет собой аномалию Шоттки, определяется перераспределением электронов по расщепленным подуровням системы двух взаимодействующих ферронов. Для заданной системы теплоемкость в присутствии магнитного поля будет иметь следующий вид: 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.

На рис. 1 изображена температурная зависимость теплоемкости. Было показано, что при появлении магнит-

ного поля зависимость теплоемкости от температуры не меняет характера. На рисунке четко видно, что график данной зависимости представляет собой аномалию Шоттки, которая наиболее выражена при малых Δ . С увеличением Δ максимумы аномалии Шоттки смещаются в область более высоких температур

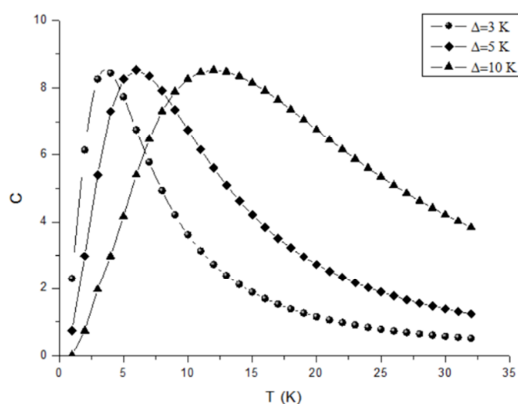


Рис.1. Зависимость теплоёмкости C от температуры T при разных Δ .

Магнитная восприимчивость соединения в независимости от направления поля будет определяться следующим образом:

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

где $g = 2$, μ_B - магнетон Бора.

На рис. 2 представлена температурная зависимость магнитной восприимчивости. С ростом Δ максимум магнитной восприимчивости резко уменьшаются и смещаются в сторону более высоких температур. Данный максимум не связан со свойствами самой халдейновской цепочки. Для случая Y_2BaNiO_5 щель в спектре магнитных возбуждений (халдейновская щель) составляет порядка 100 К, т.е. максимум аномалии Шоттки на теплоёмкости и на магнитной восприимчивости, наблюдаемый в области низких температур при внесении Ca^{2+} , обусловлен образованием ферронов.

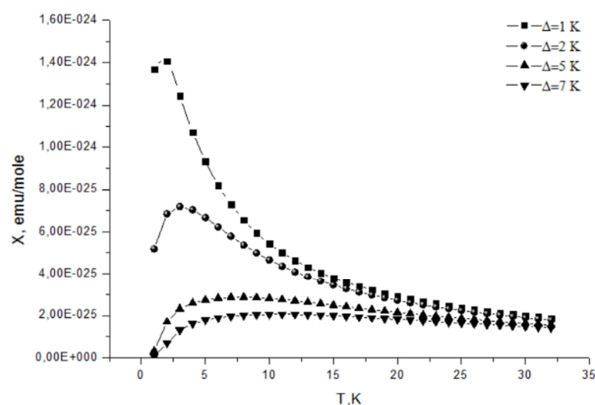


Рис.2. Зависимость магнитной восприимчивости χ от температуры T при разных Δ .

Заключение

Исследованы температурные зависимости теплоемкости и магнитной восприимчивости. Проанализирован вклад системы, состоящей из двух ферронов со спинами $S=3/2$, в теплоемкость и магнитную восприимчивость соединения

Благодарность

Статья подготовлена в ходе проведения исследования (№ 19-04-030) в рамках Программы «Научный фонд Национального исследовательского университета „Высшая школа экономики“ (НИУ ВШЭ)» в 2018 — 2019 гг. и в рамках государственной поддержки ведущих университетов Российской Федерации «5-100».

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.50.115
2. 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.
3. Guangyong Xu, G. Aeppli, M. E. Bisher. Holes in a Quantum Spin Liquid. Science Vol 289. 21 July 2000.
4. 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.