
Fizika kondenzirane snovi

Rešene naloge z vaj

Tomaž Rejec

UNIVERZA V LJUBLJANI
FAKULTETA ZA MATEMATIKO ON FIZIKO
ODDELEK ZA FIZIKO
2013

Zahvaljujem se študentom četrlih letnikov 2007/08, 2008/09, 2009/10, 2010/11 in 2011/12, ki so rokopise rešitev nalog z vaj prelili v računalniško obliko.

Kazalo

I	Madelungova konstanta	5
II	Hibridizacija orbital	15
III	Zlitine	27
IV	Razcep v kristalnem polju	33
V	Magnetizem	47
VI	Dielektrične lastnosti izolatorjev	71
VII	Landauova teorija faznih prehodov	81
VIII	Superprevodnost	91

Del I

Madelungova konstanta

Madelungova konstanta: vsota po vseh nevtralnih plasteh

Gregor Šmit

10. januar 2008

FIZIKA TRDNE SNOVI

Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

1 Madelungova konstanta: vsota po nevtralnih plasteh

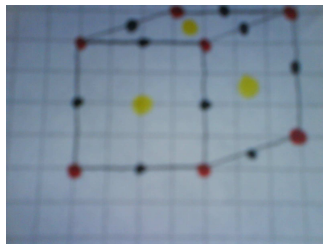
Potencial sosednjih atomov v kristalu opišemo z enačbo:

$$U = -\frac{Z^2 e_0^2}{4\pi\epsilon_0 d} \alpha.$$

V tej enačbi je Madelungova konstanta definirana kot: $\alpha = \sum_{j \neq i} \pm \frac{1}{p_{ij}}$; kjer je $r_{ij} = dp_{ij}$, d pa je razdalja med atomi.

1.1 Madelungova konstanta za prvo lupino

Za natrijev kristal, ki ima osnovno celico:



Slika 1: kristal

se α za prvo lupino izračuna tako, da pogledamo število atomov ki kaže v osnovno celico. Imamo šest atomov v centru vsake ploskve, dvanajst atomov na stranicah in osem atomov v ogliščih.

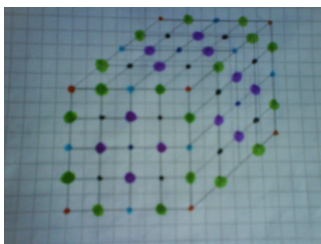
število atomov	naboj	razdalja od središča
6. rumenih	$1/2$	1
12. črnih	$-1/4$	$\sqrt{2}$
8. rdečih	$1/8$	$\sqrt{3}$

Tako je α enak:

$$\alpha_1 = \frac{6 \left(\frac{1}{2} \right)}{1} + \frac{12 \left(\frac{-1}{4} \right)}{\sqrt{2}} + \frac{8 \left(\frac{1}{8} \right)}{\sqrt{3}} = 1.4560.$$

1.2 Madelungova konstanta za drugo lupino

Pri drugi lupini pa kristal izgleda takole:



Slika 2: kristal

in njegova pripadajoča tabela:

število atomov	naboj	razdalja od središča
6	$1/2$	1
12	$-3/4$	$\sqrt{2}$
8	$7/8$	$\sqrt{3}$
6. temno modrih	$-1/2$	2
24. vijoličnih	$1/2$	$\sqrt{5}$
12. svetlo modrih	$-1/4$	$2\sqrt{2}$
8. oranžnih	$-1/8$	$2\sqrt{3}$
24. črnih	$-1/2$	$\sqrt{6}$
24. zelenih	$1/4$	3

V tabeli so upoštevani atomi ki kažejo iz osnovne celice in v kristal. Tako lahko, z enakim postopkom kot prej, izračunamo še prispevek druge lupine, ki znaša: $\alpha_2 = 0.2957$. Vsota prispevkov je: $\alpha = \alpha_1 + \alpha_2 = 1.7517$. Točen rezultat: $\alpha = 1.7476$.

Ewaldova metoda za izračun Madelungove konstante NaCl

Simon Jesenko
(Dated: 17.1.2008)

I. EWALDOVA METODA

Izračunavamo elektrostatični potencial, kot ga občuti izbrani (referenčni) ion v kristalu v prisotnosti vseh ostalih ionov. Posamezni ion obravnavamo kot točkast delec s pozitivnim oziroma negativnim nabojem. Celotni potencial razdelimo na vsoto dveh delov,

$$\varphi = \varphi_1 + \varphi_2,$$

kjer φ_1 predstavlja potencial, kot ga povzroča porazdelitev ρ_1 (slika 1), ki jo določimo kot vsoto Gaussovskih porazdelitev naboja na vsakem ionu, φ_2 pa potencial, kot ga povzroča porazdelitev ρ_2 (slika 2), katero definiramo kot nasprotno predznačeno porazdelitev ρ_1 z dodanimi δ funkcijami na položaju vsakega iona. Če si ogledamo vsoto porazdelitev $\rho = \rho_1 + \rho_2$ se seštejeta ravno v ustrezno predznačene δ -funkcije na vsakem ionu kristala.

Prispevek k potencialu smo razdelili na dva dela zato, ker vsota za φ_1 zelo hitro konvergira, če jo seštevamo v Fourierovem prostoru, φ_2 pa hitro konvergira v realnem prostoru. Seveda je hitrost konvergence odvisna od izbrane širine Gaussovsk na posameznih ionih.

Izračunajmo najprej prispevek zaradi φ_1 . K potencialu φ_1 ne prispeva ion, na položaju katerega računamo potencial. Zaradi Fourierovega razvoja potencial φ_1 ponovno razdelimo na vsoto dveh potencialov,

$$\varphi_1 = \varphi_a + \varphi_b,$$

kjer je φ_a potencial zaradi Gaussovskih porazdelitev na vseh ionih (vključno z referenčnim ionom), φ_b pa potencial zaradi negativne Gaussovske porazdelitve na referenčnem ionu. Zapišemo Fourierovo vrsto za φ_a in ustrezno porazdelitev naboja ρ_a :

$$\varphi_a = \sum_{\mathbf{K}} c_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \quad (1)$$

$$\rho_a = \sum_{\mathbf{K}} d_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K} \cdot \mathbf{r}} \quad (2)$$

kjer je $\mathbf{K}$ vektor recipročne mreže kristala, vsoti pa tečeta po vseh vektorjih recipročne mreže. Povezavo med porazdelitvijo naboja in potencialom nam določa Poissonova enačba

$$\nabla^2 \phi_a = -\frac{\rho_a}{\epsilon_0}$$

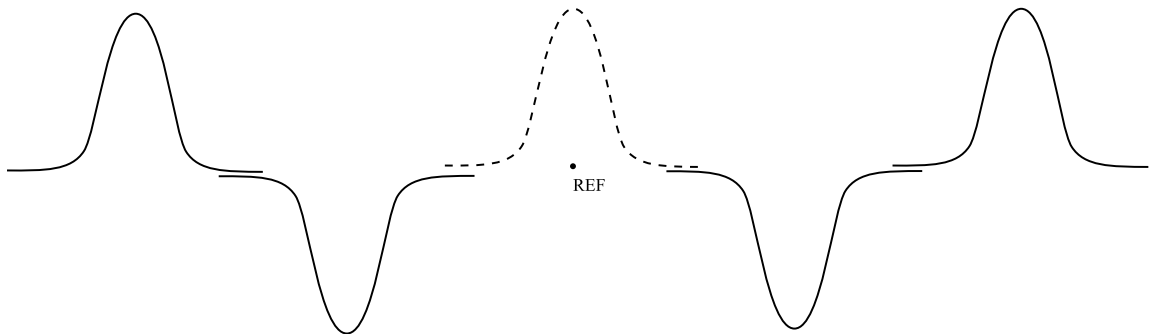


FIG. 1: Porazdelitev naboja ρ_1 , ki generira potencial φ_1 . S polno črto je označen $\rho_1 = \rho_a - \rho_b$, s črtkano pa ρ_b .

2

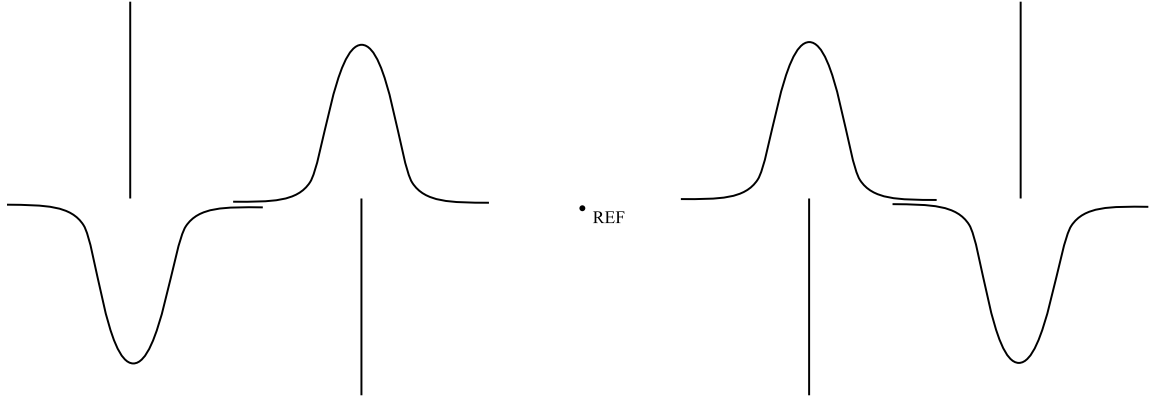


FIG. 2: Porazdelitev naboja ρ_2 , ki generira potencial φ_2 . Črte na položajih ionov predstavljajo δ -funkcije.

oziroma v Fourierovem prostoru kot

$$\sum_{\mathbf{K}} K^2 c_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} = \frac{1}{\epsilon_0} \sum_{\mathbf{K}} d_{\mathbf{K}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}},$$

iz česar sledi zveza za koeficiente

$$c_{\mathbf{K}} = \frac{1}{\epsilon_0} \frac{d_{\mathbf{K}}}{K^2} \quad (3)$$

Najprej poiščemo Fourierove koeficiente za porazdelitev naboja $d_{\mathbf{K}}$. Za vsako točko Bravaisove mreže baza vsebuje ione z nabojem q_i na položajih $\mathbf{r}_i$. Na položajih ionov v bazi za porazdelitev naboja vzamemo Gaussovske porazdelitve

$$\rho(\mathbf{r}) = q_i (\eta/\pi)^{3/2} e^{-\eta r^2},$$

kjer nam predfaktor določa ustrezno normalizacijo naboja (integral po celotnem prostoru je ravno q_i), η pa nam določa širino Gaussovke in določa hitrost konvergence. Koeficiente razvoja $d_{\mathbf{K}}$ običajno dobimo z množenjem enačbe (2) z $e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}}$ in integracijo po volumnu Δ ene celice. Pri tem bi morali upoštevati, da porazdelitev naboja obsega prispevke zaradi Gaussovke na ionih v osnovni celici, kot tudi repe Gaussovke vseh ionov izven celice. Integraciji po eni celici z upoštevanjem prispevkov Gaussovke po celotnem prostoru je ekvivalentna integracija po celotnem prostoru z upoštevanjem Gaussovke v eni sami osnovni celici. Tako dobimo

$$d_{\mathbf{K}} \int_{\text{ena celica}} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r} = d_{\mathbf{K}} \Delta = \int_{\text{ves prostor}} \sum_i q_i (\eta/\pi)^{3/2} e^{-\eta(\mathbf{r}-\mathbf{r}_i)^2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}} d\mathbf{r}$$

kar je enako

$$d_{\mathbf{K}} \Delta = \sum_i q_i e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_i} (\eta/\pi)^{3/2} \int_{\text{ves prostor}} e^{i\mathbf{G}\cdot\boldsymbol{\xi} + \eta \boldsymbol{\xi}^2} d\boldsymbol{\xi} = \left(\sum_i q_i e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r}_i} \right) e^{-\frac{K^2}{4\eta}} = S(\mathbf{K}) e^{-\frac{K^2}{4\eta}}$$

kjer je $S(\mathbf{K})$ kar strukturni faktor za kristalno mrežo, kot smo ga definirali pri obravnavi sipanja na kristalih.

Ko imamo izračunane Fourierove koeficiente $d_{\mathbf{K}}$ za porazdelitev naboja, lahko z upoštevanjem enačb (1) in (3) zapišemo potencial φ_a v realnem prostoru kot

$$\varphi_a = \frac{1}{\epsilon_0 \Delta} \sum_{\mathbf{K}} S(\mathbf{K}) K^{-2} e^{i\mathbf{K}\cdot\mathbf{r} - \frac{K^2}{4\eta}} \quad (4)$$

Na položaju referenčnega iona $\mathbf{r} = 0$ tako znaša

$$\varphi_a = \frac{1}{\epsilon_0 \Delta} \sum_{\mathbf{K}} S(\mathbf{K}) K^{-2} e^{-\frac{K^2}{4\eta}} \quad (5)$$

Izračunati moramo še potencial φ_b zaradi Gaussovske porazdelitve na referenčnem ionu. Potencial dobimo tako, da pointegriramo prispevek vsake lupine na oddaljenosti r po celém prostoru,

$$\varphi_b = \int_0^\infty \frac{\rho(r)}{4\pi\epsilon_0 r} 4\pi r^2 dr = \frac{q}{2\epsilon_0} \sqrt{\frac{\eta}{\pi^3}}$$

Celotni prispevek k potencialu zaradi porazdelitve ρ_1 se tako glasi

$$\varphi_1 = \frac{1}{\epsilon_0 \Delta} \sum_{\mathbf{K}} S(\mathbf{K}) K^{-2} e^{-\frac{K^2}{4\eta}} - \frac{q}{2\epsilon_0} \sqrt{\frac{\eta}{\pi^3}}.$$

Preostane nam še izračun potenciala φ_2 , katerega pa bomo izračunali kar v realnem prostoru. Potencial, ki ga prispeva vsak ion (prispevek zaradi ρ_2), lahko razdelimo na tri dele - potencial zaradi δ -funkcije, potencial zaradi dela Gaussovke, ki se ne prekriva z referenčno točko ($r < r_l$), in prekrivajočim delom ($r > r_l$).

$$\varphi_2 = \sum_l \frac{q_l}{4\pi\epsilon_0} \left[\frac{1}{r_l} - \frac{1}{r_l} \int_0^{r_l} \rho(\mathbf{r}) d\mathbf{r} - \int_{r_l}^\infty \frac{\rho(\mathbf{r})}{r} d\mathbf{r} \right],$$

kjer vsota teče po vseh ionih v kristalu, razen referenčnega. Za $\rho(\mathbf{r})$ vstavimo zgoraj definirano Gaussovsko porazdelitev naboja, in izraz za potencial se poenostavi na

$$\varphi_2 = \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_l \frac{q_l}{r_l} F(\eta^{1/2} r_l),$$

kjer je

$$F(x) = (2/\pi^{1/2}) \int_x^\infty e^{-s^2} ds = 1 - \text{erf}(x)$$

Iskani potencial na referenčni točki se tako glasi

$$\varphi = \frac{1}{\epsilon_0 \Delta} \sum_{\mathbf{K}} S(\mathbf{K}) K^{-2} e^{-\frac{K^2}{4\eta}} - \frac{q}{2\epsilon_0} \sqrt{\frac{\eta}{\pi^3}} + \frac{1}{4\pi\epsilon_0} \sum_l \frac{q_l}{r_l} F(\eta^{1/2} r_l)$$

Za izračun Madelungove konstante α potrebujemo še povezavo le te z izračunanim potencialom:

$$\varphi = \alpha \frac{q}{4\pi\epsilon_0 R}$$

kjer je R razdalja med najbližjima ionoma v kristalu.

II. KRISTAL NaCl

Za osnovno celico kristala vzamemo kar ploskovno centrirano (FCC) kubično mrežo s stranico a . Bazni vektorji do Na ionov se glasijo

$$\mathbf{r}_1 = (0, 0, 0), \quad \mathbf{r}_2 = \frac{a}{2}(1, 1, 0), \quad \mathbf{r}_3 = \frac{a}{2}(1, 0, 1), \quad \mathbf{r}_4 = \frac{a}{2}(0, 1, 1)$$

Za Cl ione pa samo zamaknjeni za polovico mrežne razdalje

$$\Delta \mathbf{r} = \frac{a}{2}(1, 0, 0)$$

$$\mathbf{r}_{Cl} = \mathbf{r}_{Na} + \Delta \mathbf{r}$$

Recipročni vektorji za FCC mrežo se zapišejo kot

$$\mathbf{K} = \frac{2\pi}{a}(m_1, m_2, m_3)$$

Strukturni faktor zapišemo kot

$$S(\mathbf{K}) = q_0 \left[1 + e^{-i\pi(m_1+m_2)} + e^{-i\pi(m_3+m_2)} + e^{-i\pi(m_1+m_3)} \right] \left[1 - e^{-i\pi m_1} \right],$$

kjer smo upoštevali da imajo Na in Cl ioni nasprotno predznačen naboj. Iz gornjega izraza izluščimo:

- m_1, m_2, m_3 so vsi lihi, $S(\mathbf{K}) = 8$
- sicer $S(\mathbf{K}) = 0$

Strukturni faktor in izračunane bazne vektorje upoštevamo pri izračunu vsote za potencial φ . Ogledal sem si odvisnost hitrosti konvergence od parametra η . Pri ugodni izbiri η lahko že z vsoto po 3 lupinah dosežemo natančnost v okviru numerike ($\epsilon \approx 10^{-16}$).

Navedimo še na 10 decimalk natančno Madelungovo konstanto:

$$\alpha = 1.7475645946$$

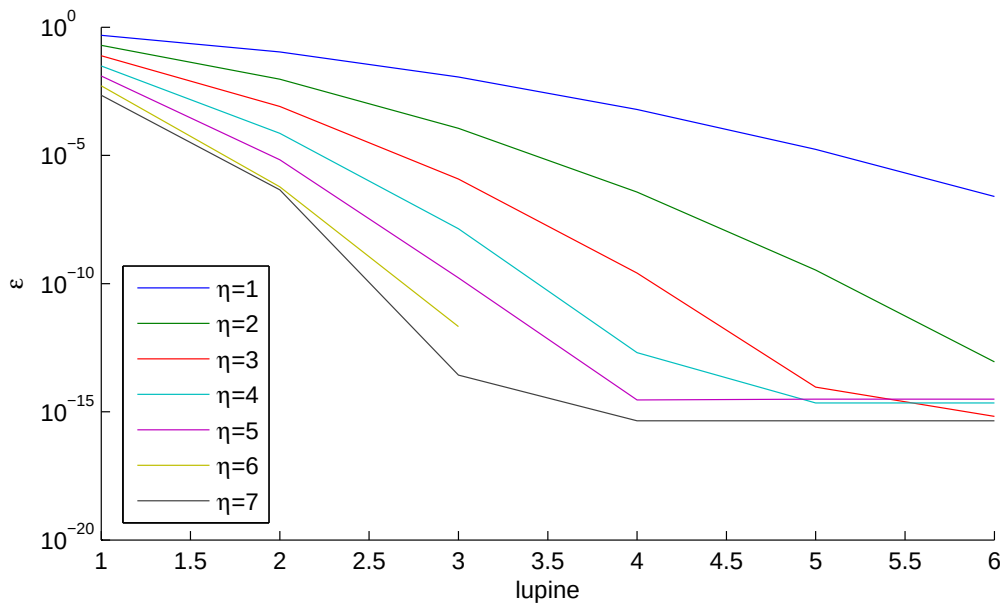


FIG. 3: Konvergenca Madelungove konstante $|\alpha_{\text{exact}} - \alpha|$ v odvisnost od parametra η . Na abscisi je število lupin, ki jih upoštevamo v vsoti (v realnem in recipročnem prostoru).

Del II

Hibridizacija orbital

Trdna snov
Hibridizacija orbital

Gregor Posnjak

gregor.posnjak@gmail.com

Fakulteta za matematiko in fiziko, Univerza v Ljubljani

(Dated: 18. januar 2008)

I. NALOGA

Sestavi sp_3 hibridizirane orbitale iz vodikovih orbital in pokaži, da tvorijo tetraeder.

II. REŠITEV

Sp_3 hibridizirane orbitale bomo sestavljali iz 2s ($n = 2$, $l = 0$) in 2p ($n = 2$, $l = 1$) orbital. Njihovo obliko najdemo v literaturi:

$$\psi_{n,l,m}(r, \theta, \phi) = R_{n,l}(r) Y_{l,m}(\theta, \phi) .$$

Kjer so:

$$\begin{aligned} R_{2,0}(r) &= \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} \left(2 - \frac{r}{r_B} \right) e^{-\frac{r}{2r_B}} , \\ R_{2,1}(r) &= \frac{1}{\sqrt{3} (2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} , \\ Y_{0,0}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} , \\ Y_{1,0}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{\pi}} \cos \theta , \\ Y_{1,1}(\theta, \phi) &= -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{i\phi} , \\ Y_{1,-1}(\theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3}{2\pi}} \sin \theta e^{-i\phi} . \end{aligned}$$

V literaturi (npr. Strnad: Fizika 3, stran 312) najdemo naslednji recept za tvorjenje sp_3 hibridiziranih orbital:

$$\begin{pmatrix} sp_3^{(1)} \\ sp_3^{(2)} \\ sp_3^{(3)} \\ sp_3^{(4)} \end{pmatrix} = \frac{1}{2} \begin{pmatrix} 1 & 1 & 1 & 1 \\ 1 & 1 & -1 & -1 \\ 1 & -1 & -1 & 1 \\ 1 & -1 & 1 & -1 \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s \\ p_x \\ p_y \\ p_z \end{pmatrix}$$

Na desni strani te matrične enačbe namesto p orbital z dobrodefinirano z komponento vrtilne količine, ki smo jih vajeni iz kvantne mehanike, nastopajo orbitale, ki se jih uporablja v kemiji za razlago vezi med atomi in so usmerjene v smeri koordinatnih osi (p_x v smeri x osi in tako naprej).

Da bi sestavili p_i orbitale ($i = x, y, z$), najprej zapišimo celotne valovne funkcije standardnih $p_{l,m}$ orbital:

$$\begin{aligned} \psi_{2,1,0}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} \cos \theta , \\ \psi_{2,1,-1}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} (\cos \phi - i \sin \phi) \sin \theta , \\ \psi_{2,1,1}(r, \theta, \phi) &= \frac{1}{2} \sqrt{\frac{1}{2\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} (-\cos \phi - i \sin \phi) \sin \theta . \end{aligned}$$

Ker vemo, da v krogelnih koordinatah velja:

$$\begin{aligned} x &= r \cos \phi \sin \theta , \\ y &= r \sin \phi \sin \theta , \\ z &= r \cos \theta , \end{aligned}$$

vidimo, da $\psi_{2,1,0}$ že ustreza p_z , p_x in p_y pa dobimo takole:

$$\begin{aligned} p_x &= \frac{1}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} - \psi_{2,1,1}) , \\ p_y &= \frac{i}{\sqrt{2}} (\psi_{2,1,-1} + \psi_{2,1,1}) . \end{aligned}$$

Iz tega sledi, da bomo uporabljali orbitale:

$$\begin{aligned} s &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \left(2 - \frac{r}{r_B} \right) , \\ p_x &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} \cos \phi \sin \theta , \\ p_y &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} \sin \phi \sin \theta , \\ p_z &= \frac{1}{2\sqrt{\pi}} \frac{1}{(2r_B)^{\frac{3}{2}}} e^{-\frac{r}{2r_B}} \frac{r}{r_B} \cos \theta . \end{aligned}$$

Sedaj sestavimo orbitalo $sp_3^{(1)}$ in poiščimo njeno orientacijo v prostoru.

$$\begin{aligned} sp_3^{(1)} &= \frac{1}{2} [s + p_x + p_y + p_z] \Rightarrow \\ sp_3^{(1)} &= C e^{-\frac{r}{2r_B}} \left[2 + \frac{r}{r_B} ((\cos \phi + \sin \phi) \sin \theta + \cos \theta - 1) \right] . \end{aligned}$$

Da bi našli orientacijo orbitale, bi načeloma morali izračunati verjetnostno gostoto, ter poiskati pod katerima kotoma ϕ in θ se nahaja njen maksimum. Opazimo lahko, da imajo valovne funkcije sp_3 orbital le realni del, kar pomeni, da je verjetnostna gostota kar njihov kvadrat in se njen maksimum nahaja pri istih kotih kot maksimum samih valovnih funkcij. Za naš namen torej zadostuje odvajanje valovnih funkcij po ϕ in θ .

Če odvajamo $sp_3^{(1)}$, dobimo:

$$\frac{\partial sp_3^{(1)}}{\partial \phi} = 0 \Rightarrow (-\sin \phi + \cos \phi) \sin \theta = 0 \quad , \quad (1)$$

$$\frac{\partial sp_3^{(1)}}{\partial \theta} = 0 \Rightarrow (\cos \phi + \sin \phi) \cos \theta - \sin \theta = 0 \quad . \quad (2)$$

Prvi enačbi je zadoščeno, če velja $\sin \theta = 0$ (torej dobimo za rešitvi $\theta_1 = 0$ in $\theta_2 = 180^\circ$) ali pa $-\sin \phi + \cos \phi = 0$ (temu ustrežata rešitvi $\phi_3 = 45^\circ$ in $\phi_4 = 225^\circ$).

Za prvi in drugi primer ($\sin \theta = 0$) dobimo iz enačbe (2):

$$\cos \phi + \sin \phi = 0 \quad ,$$

iz česar sledi $\phi_1 = 135^\circ$ in $\phi_2 = 315^\circ$.

Za tretji in četrti primer lahko preoblikujemo enačbo (2) v:

$$\tan \theta = \cos \phi + \sin \phi \quad ,$$

in dobimo:

$$\tan \theta_3 = \sqrt{2} \Rightarrow \theta_3 = 54,74^\circ \quad ,$$

$$\tan \theta_4 = -\sqrt{2} \Rightarrow \theta_4 = 125,26^\circ \quad .$$

Iz teh štirih rešitev (iščemo orientacijo orbitale, torej je rešitev par kotov θ in ϕ), moramo poiskati tisto, ki ustreza maksimumu valovne funkcije. Če si ogledamo obliko valovne funkcije $sp_3^{(1)}$, vidimo, da je od orientacije v prostoru odvisen samo del $(\cos \phi + \sin \phi) \sin \theta + \cos \theta = f(\theta, \phi)$. Da bi poiskali smer maksimuma valovne funkcije, moramo torej primerjati vrednosti $f(\theta_i, \phi_i)$ za $i = 1, 2, 3, 4$.

$$f(\theta_1, \phi_1) = 1 \quad ,$$

$$f(\theta_2, \phi_2) = -1 \quad ,$$

$$f(\theta_3, \phi_3) = \sqrt{2} \quad ,$$

$$f(\theta_4, \phi_4) = -\sqrt{2} \quad .$$

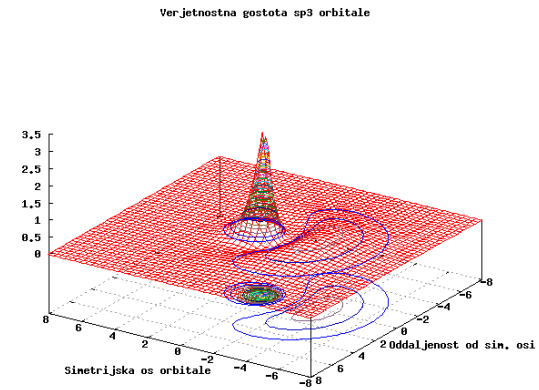
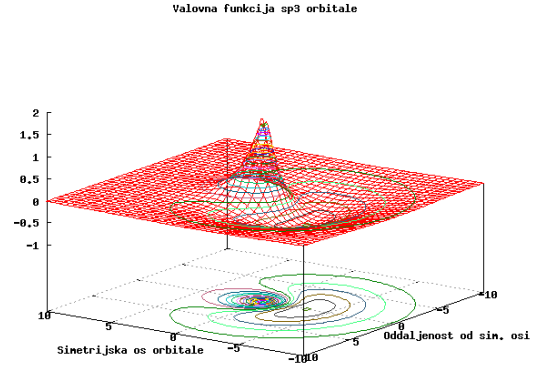
Tukaj smo si pri računanju pomagali z geometrijskima zvezama:

$$\cos \theta = \pm \frac{1}{\sqrt{1 + \tan^2 \theta}} \quad ,$$

$$\sin \theta = \pm \frac{\tan \theta}{\sqrt{1 + \tan^2 \theta}} \quad .$$

Vidimo, da ima $f(\theta, \phi)$ ekstremno vrednost pri orientacijah 3 in 4. Z razmislekom lahko opazimo tudi, da ti

Slika 1: Graf valovne funkcije in verjetnostne gostote sp_3 orbitale. X os predstavlja simetrijsko os orbitale, y os pa oddaljenost od simetrijske osi.



dve orientaciji ležita na isti premici, ki gre skozi izhodišče koordinatnega sistema. Maksimum verjetnostne gostote za $sp_3^{(1)}$ torej leži nekje na tej premici in ta premica predstavlja simetrijsko os orbitale (glej sliko 1).

Če ta postopek ponovimo še za ostale sp_3 orbitale, bomo za njihove orientacije dobili:

$sp_3^{(j)}$	θ_j	ϕ_j
$sp_3^{(1)}$	$54,74^\circ$	45°
$sp_3^{(2)}$	$125,26^\circ$	315°
$sp_3^{(3)}$	$54,74^\circ$	225°
$sp_3^{(4)}$	$125,26^\circ$	135°

Vse, kar nam še ostane je, da preverimo, kakšni so koti med orbitalami. Za ta namen bomo potrebovali enotske vektorje, ki kažejo v smeri vsake izmed orbital:

$$\hat{e}_j = \begin{pmatrix} \cos \phi_j \sin \theta_j \\ \sin \phi_j \sin \theta_j \\ \cos \theta_j \end{pmatrix}$$

Tako dobimo:

$$[\hat{e}_1, \hat{e}_2, \hat{e}_3, \hat{e}_4] = \begin{pmatrix} \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} \\ \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & \frac{1}{\sqrt{3}} & -\frac{1}{\sqrt{3}} \end{pmatrix}$$

Da bi izračunali kote med pari orbital, uporabimo ska-

larni produkt:

$$\cos \alpha_{j,k} = \hat{e}_j \cdot \hat{e}_k \quad .$$

Če izračunamo vrednost tega izraza za vse pare orbital, vidimo, da v vseh primerih velja $\cos \alpha = -\frac{1}{3}$, kar ustreza kotu $\alpha = 109.5^\circ$. Ta kot ustreza tetraederskemu.

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



Fizika kondenzirane snovi -1. letnik, II. stopnja

HIBRIDIZACIJA MOLEKULSKIH ORBITAL

Avtor: Katja Vozel

Ljubljana, februar 2011

NALOGA

Za molekulo C_2 izračunajmo orbitale in njihove energije. Podatki:

$\varepsilon_s = -17.52 \text{ eV}$ energija 2s orbitale

$\varepsilon_p = -8.97 \text{ eV}$ energija $2p_{(x,y,z)}$ orbitale

$d = 1.24 \text{ \AA}$ razdalja med atomoma

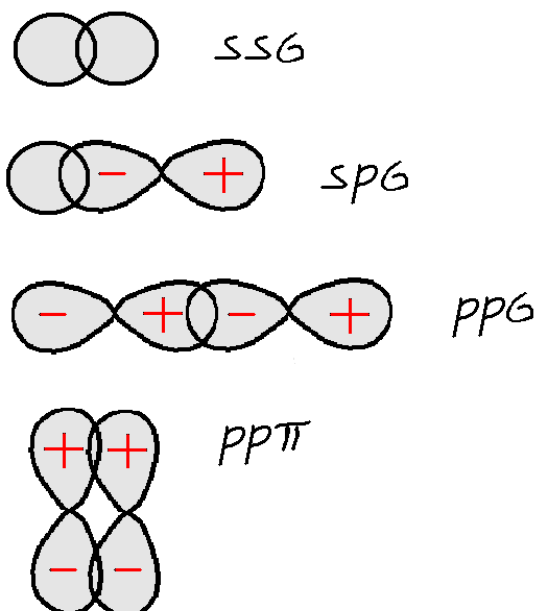
$\hbar/m_e = 7.62 \text{ eV \AA}^2$

$\eta_{ss\sigma} = -1.40 \text{ eV}$

$\eta_{sp\sigma} = 1.84 \text{ eV}$

$\eta_{pp\sigma} = 3.24 \text{ eV}$

$\eta_{pp\pi} = -0.81 \text{ eV}$



Slika 1: Kombinacije z neničelnimi prekrivalnimi integrali.

Prekrivalni integrali so

$$V_{ss\sigma} = \frac{\eta_{ss\sigma} \hbar^2}{m_e d^2}$$

in analogno za $V_{sp\sigma}$, $V_{pp\sigma}$ in $V_{pp\pi}$.

REŠITEV

Vsak C atom ima 4 valenčne elektrone, skupno imamo torej 8 valenčnih elektronov, ki bodo zasedli 4 orbitale z najnižjo energijo. Splošni nastavek za valovno

funkcijo je

$$|\psi\rangle = \sum_{i=1}^8 c_i |i\rangle,$$

kjer je $|i\rangle$ orbitala iz množice $\{2s, 2p_x, 2p_y, 2p_z\}$.

V splošnem imamo 64 možnih parov orbital enega in drugega atoma, vendar so nekateri prekrivalni integrali ničelni. Iz simetrije je razvidno, da se ne bodo mešale orbitale, ki so pravokotne na zveznico med atomoma. x os naj kaže v desno, y v ravnino lista in z naj kaže gor; če C atoma ležita na osi x , se na primer p_x in p_y orbitali ne mešata. Opazimo, da matrika kombinacij orbital razpade na 3 podmatrike. Indeksa 1 in 2 pomenita elektron na prvem ali na drugem atomu.

	s ₁	s ₂	p _{x1}	p _{x2}	p _{y1}	p _{y2}	p _{z1}	p _{z2}
s ₁								
s ₂								
p _{x1}								
p _{x2}								
p _{y1}								
p _{y2}								
p _{z1}								
p _{z2}								

Slika 2: Matrika prekrivalnih integralov razpade na tri podmatrike; siva področja so ničelna.

Tako računamo vsako podmatriko posebej. Prvi del je

$$\begin{bmatrix} \varepsilon_s & V_{ss\sigma} & 0 & V_{sp\sigma} \\ V_{ss\sigma} & \varepsilon_s & -V_{sp\sigma} & 0 \\ 0 & -V_{sp\sigma} & \varepsilon_p & V_{pp\sigma} \\ V_{sp\sigma} & 0 & V_{pp\sigma} & \varepsilon_p \end{bmatrix}$$

Treba je najti lastne energije in lastne vektorje, ki nam bodo dali kombinacije orbital. Vemo, da je potencial dveh atomov simetričen glede na ravnino, pravokotno na središče zveznice med atomoma. Kadar imamo simetričen potencial, so lastne valovne funkcije lahko le sode ali lihe. Tako sestavimo nove bazne funkcije, kjer z indeksom g označimo sodost, z indeksom u pa lihost:

$$|s_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s_1\rangle + |s_2\rangle)$$

$$|s_u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|s_1\rangle - |s_2\rangle)$$

$$|p_g\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1\rangle - |p_2\rangle)$$

$$|p_u\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}(|p_1\rangle + |p_2\rangle)$$

Simetrična funkcija s orbital je vsota orbital na atomih, simetrična funkcija p orbital pa je zaradi oblike in polarnosti razlika orbital obeh atomov.

Valovno funkcijo iščemo v obliki

$$|\psi\rangle = v_1|s_g\rangle + v_2|p_g\rangle + v_3|s_u\rangle + v_4|p_u\rangle$$

(izpustili smo indeks osi x).

Glede na nove bazne funkcije dobimo novo matriko, ki je bločna; vsebuje dva neničelna bloka 2×2 , saj so matrični koeficienti, ki predstavljajo prekrivalne integrale med sodimi in lihimi funkcijami, ničelni.

Matrične koeficiente izračunamo:

$$\begin{aligned}\langle s_g|H|s_g\rangle &= \frac{1}{2}(\langle s_1|H|s_1\rangle + \langle s_1|H|s_2\rangle + \langle s_2|H|s_1\rangle + \langle s_2|H|s_2\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(2\varepsilon_s + 2V_{ss\sigma}) = \varepsilon_s + V_{ss\sigma}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle s_u|H|s_u\rangle &= \frac{1}{2}(\langle s_1|H|s_1\rangle - \langle s_1|H|s_2\rangle - \langle s_2|H|s_1\rangle + \langle s_2|H|s_2\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(2\varepsilon_s - 2V_{ss\sigma}) = \varepsilon_s - V_{ss\sigma}\end{aligned}$$

$$\langle p_g|H|p_g\rangle = \varepsilon_p - V_{pp\sigma}$$

$$\langle p_u|H|p_u\rangle = \varepsilon_p + V_{pp\sigma}$$

$$\begin{aligned}\langle s_g|H|p_g\rangle &= \frac{1}{2}(\langle s_1|H|p_1\rangle - \langle s_1|H|p_2\rangle + \langle s_2|H|p_1\rangle - \langle s_2|H|p_2\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(2 \cdot 0 - 2V_{sp\sigma}) = -V_{sp\sigma}\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\langle s_u|H|p_u\rangle &= \frac{1}{2}(\langle s_1|H|p_1\rangle + \langle s_1|H|p_2\rangle - \langle s_2|H|p_1\rangle - \langle s_2|H|p_2\rangle) = \\ &= \frac{1}{2}(2 \cdot 0 + 2V_{sp\sigma}) = V_{sp\sigma}\end{aligned}$$

Iščemo lastne vrednosti nove matrike, torej računamo determinanto

$$\det \begin{bmatrix} \varepsilon_s + V_{ss\sigma} - E & -V_{sp\sigma} & 0 & 0 \\ -V_{sp\sigma} & \varepsilon_p - V_{pp\sigma} - E & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \varepsilon_s - V_{ss\sigma} - E & V_{sp\sigma} \\ 0 & 0 & V_{sp\sigma} & \varepsilon_p + V_{pp\sigma} - E \end{bmatrix}$$

Obravnavamo lahko vsak blok posebej; prvi ima za bazne vektorje sode kombinacije, drugi pa lihe.

Za lastne energije dobimo

$$E_1 = -33.87 \text{ eV},$$

$$E_2 = -15.62 \text{ eV},$$

$$E_3 = -14.44 \text{ eV}$$

in

$$E_4 = 10.95 \text{ eV}.$$

Ustrezni lastni vektorji so po vrsti

$$0.70|s_g\rangle + 0.72|p_g\rangle,$$

$$-0.72|s_g\rangle + 0.70|p_g\rangle,$$

$$-0.92|s_u\rangle + 0.39|p_u\rangle$$

in

$$0.39|s_u\rangle + 0.92|p_u\rangle.$$

Nadaljujmo na podmatriki za p_y orbitale. Bazni funkciji sta sedaj $|p_{y1}\rangle$ in $|p_{y2}\rangle$. Računamo determinanto

$$\det \begin{bmatrix} \varepsilon_p - E & V_{pp\pi} \\ V_{pp\pi} & \varepsilon_p - E \end{bmatrix}$$

Lastni energiji sta

$$E_5 = -12.98 \text{ eV},$$

in

$$E_6 = -4.96 \text{ eV},$$

ustrezna lastna vektorja pa

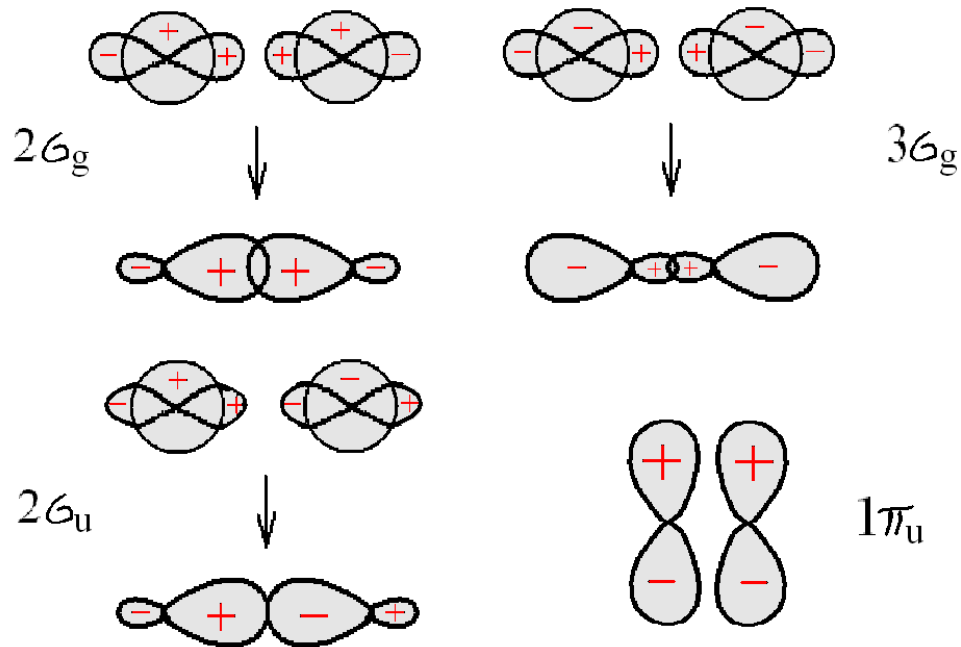
$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|p_{y1}\rangle + |p_{y2}\rangle)$$

in

$$\frac{1}{\sqrt{2}}(|p_{y1}\rangle - |p_{y2}\rangle).$$

Za p_{yz} orbitale zaradi simetrije dobimo enako, kar pomeni da sta energiji E_5 in E_6 dvakrat degenerirani.

Sedaj izberemo štiri orbitale z najnižjimi energijami, to so E_1 , E_2 , E_3 in E_5 . Nazadnje le še narišimo te štiri hibridizirane orbitale, v katerih se nahajajo valenčni elektroni molekule C_2 .



Slika 3: Hibridizirane orbitale. Skica levo zgoraj ustreza energiji E_1 in ustreznemu lastnemu vektorju, skica desno zgoraj ustreza energiji E_2 , levo spodaj energiji E_3 in desno spodaj energiji E_5 .

Del III

Zlitine

Ravnovesna koncentracija v zlitinah

Tara Nanut

6.3.2012

1 Naloga

Imamo zlitino, ki vsebuje dve vrsti atomov: A in B. Vseh atomov je N, od tega je M atomov vrste A in N-M atomov vrste B. Koncentracijo atomov A označimo s $c = \frac{M}{N}$. Na predavanjih smo izračunali ravnovesno koncentracijo ob dveh predpostavkah:

1. Število atomov B je zelo majhno
2. Vsi atomi imajo enako energijo/atom

Sedaj bomo izračunali ravnovesno koncentracijo bolj v splošnem.

2 Prosta energija

Predpostavimo, da je energija atoma odvisna od njegovih sosedov: imejmo člen ϵ_{AA} med dvema atomoma A, člen ϵ_{BB} med dvema atomoma B in člen ϵ_{AB} med atomoma A in B. Vsak atom ima Z sosedov. Energijo atoma vrste A in B lahko zapišemo:

$$\epsilon_A = \frac{Z}{2} (c\epsilon_{AA} + (1-c)\epsilon_{AB}) \quad (1)$$

$$\epsilon_B = \frac{Z}{2} (c\epsilon_{AB} + (1-c)\epsilon_{BB})$$

Prosta energija takega sistema je

$$F = E_{celotna} - TS \quad (2)$$

Vemo, da je v ravnovesju prosta energija minimalna; iz tega pogoja bomo dobili ravnovesno koncentracijo. Posebaj izračunajmo oba dela proste energije; celotno energijo in entropijski člen.

3 Celotna energija

Celotna energija je

$$E_{celotna} = M\epsilon_A + (N-M)\epsilon_B = N(c\epsilon_A + (1-c)\epsilon_B) \quad (3)$$

Namesto koncentracije c bomo uvedli odstopanje od polovične koncentracije $\tilde{c}$, tako da velja $c = \frac{1}{2} + \tilde{c}$. Sedaj nam $\tilde{c} = 0$ predstavlja zlitino s točno polovico atomi A in polovico atomi B, $\tilde{c} = \frac{1}{2}$ pomeni, da imamo samo atome A in $\tilde{c} = -\frac{1}{2}$ pomeni, da imamo samo atome B. Takšna notacija je simetrična in grafično bolj pregledna.

Sedaj vstavimo v zgornjo enačbo energije atomov A in B ter nadomestimo c s $\tilde{c}$, pa dobimo

$$E_{celotna} = \frac{NZ}{2} \left[\left(\frac{1}{4} + \tilde{c} + \tilde{c}^2 \right) \epsilon_{AA} + 2 \left(\frac{1}{4} - \tilde{c}^2 \right) \epsilon_{AB} + \left(\frac{1}{4} - \tilde{c} + \tilde{c}^2 \right) \epsilon_{BB} \right] \quad (4)$$

Sedaj poberemo skupaj vse člene brez $\tilde{c}$, člene linearne v $\tilde{c}$ in člene s $\tilde{c}^2$:

$$E_{celotna} = \frac{NZ}{2} \left[\frac{\epsilon_{AA} + 2\epsilon_{AB} + \epsilon_{BB}}{4} + (\epsilon_{AA} - \epsilon_{BB})\tilde{c} + (\epsilon_{AA} - 2\epsilon_{AB} + \epsilon_{BB})\tilde{c}^2 \right] \quad (5)$$

Prvi člen je neodvisen od koncentracije in nas ne bo zanimal. Koeficient v linearnem členu označimo z $\epsilon = \frac{Z}{2}(\epsilon_{AA} - \epsilon_{BB})$, koeficient pred $\tilde{c}^2$ pa se v literaturi tipično označuje s $4V$. Lahko pokažemo, da je $4V$ (oz. večkratnik $4V$) ravno energija, ki je potrebna, da v mreži zamenjamo atoma A in B.

V mreži ima atom A N_A sosedov vrste A in N_B sosedov vrste B. Atom B ima N'_A sosedov A in N'_B sosedov B. Ko zamenjamo atoma A in B, je ravno obratno (B ima N_A sosedov itd.). Število sosedov je konstantno, zato velja $N_A + N_B = N'_A + N'_B$. Pred menjavo je energija tega sistema

$$E_i = N_A \epsilon_{AA} + (N_B + N'_A) \epsilon_{AB} + N'_B \epsilon_{BB} \quad (6)$$

Po menjavi pa

$$E_f = N'_A \epsilon_{AA} + (N_A + N'_B) \epsilon_{AB} + N_B \epsilon_{BB} \quad (7)$$

Razlika energije je ob upoštevanju enačbe o konstantnem številu sosedov:

$$\Delta E = (N'_A - N_A) \epsilon_{AA} + (N_A + N'_B - N_B - N'_A) \epsilon_{AB} + (N_B - N'_B) \epsilon_{BB} = (N'_A - N_A) (\epsilon_{AA} + \epsilon_{BB} - 2\epsilon_{AB}) \quad (8)$$

Drugi člen je ravno $4V$; vidimo, da je razlika energije ob menjavi A in B atoma enaka večkratniku $4V$.

4 Entropijski člen

Entropija je

$$S = k_B \ln \frac{N!}{M!(N-M)!} \quad (9)$$

Desno stran enačbe razvijemo po Stirlingovi formuli $N! \doteq N^N e^{-N}$ in ugotovimo, da se vsi eksponentni členi pokrajšajo. Enačbo se malo preoblikujemo, da dobimo

$$S = k_B \ln \frac{1}{c^M (1-c)^{N(1-c)}} = -N [c \ln c - (1-c) \ln (1-c)] \quad (10)$$

Še c nadomestimo s $\tilde{c}$:

$$\frac{S}{N} = - \left[\left(\frac{1}{2} + \tilde{c} \right) \ln \left(\frac{1}{2} + \tilde{c} \right) + \left(\frac{1}{2} - \tilde{c} \right) \ln \left(\frac{1}{2} - \tilde{c} \right) \right] \quad (11)$$

5 Ravnovesna koncentracija

Sedaj lahko zapišemo enačbo proste energije kot

$$\frac{F}{N} = \epsilon \tilde{c} + \lambda \tilde{c}^2 + k_B T \left[\left(\frac{1}{2} + \tilde{c} \right) \ln \left(\frac{1}{2} + \tilde{c} \right) + \left(\frac{1}{2} - \tilde{c} \right) \ln \left(\frac{1}{2} - \tilde{c} \right) \right] \quad (12)$$

kjer smo definirali $\lambda = \frac{Z}{2} 4V$, konstantni člen pa smo izpustili, ker k ravnovesni koncentraciji ne prispeva. Ravnovesno koncentracijo dobimo iz pogoja $\frac{\partial F}{\partial \tilde{c}} = 0$.

V priloženi Mathematica datoteki si lahko pogledamo, kako ti trije parametri (ϵ , λ in T) vplivajo na ravnovesno koncentracijo (kje imajo minimum). Vsak zase teži k določeni ravnovesni koncentraciji, s kombiniranjem pa vidimo, da dobimo minimum pri poljubnem $\tilde{c}$.

6 Dodatek: prispevek entropijskega člena

Pokažimo se, da entropijski člen sam zase res teži k ravnovesni polovični koncentraciji. Za ta račun lahko vzamemo $\lambda = 0$.

$$\begin{aligned} \frac{F}{N} &= \epsilon c + k_B T [c \ln c + (1-c) \ln (1-c)] \\ \frac{\partial F}{\partial c} &= \epsilon + k_B T \left[\ln c + 1 - \frac{1}{1-c} - \ln (1-c) + \frac{c}{1-c} \right] = 0 \\ \epsilon + k_B T [\ln c - \ln (1-c)] &= 0 \end{aligned} \quad (13)$$

$$-\epsilon = k_B T \frac{c}{1-c}$$

Ravnovesna koncentracija je

$$c = \frac{1}{e^{\frac{\epsilon}{k_B T}} + 1} \quad (14)$$

Vidimo, da za primer $\epsilon \rightarrow 0$ dobimo $c = \frac{1}{2}$ (oz $\tilde{c} = 0$).

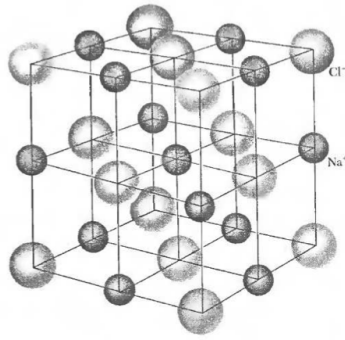
Del IV

Razcep v kristalnem polju

Razcep v kristalnem polju

Matej Krajnc

Obravnavajmo vpliv kristalnega polja na energije valenčnih orbital iona, ki ga obkroža šest nabojev z oktahedralno simetrijo. Primer lahko najdemo v kristalu NaCl, kjer je vsak ion natrija obkrožen s šestimi ioni klora. Elektrostatska interakcija med šestimi naboji q na položajih $(\pm d, 0, 0)$, $(0, \pm d, 0)$, $(0, 0, \pm d)$ ter elektroni petih $3d$ orbital iona v izhodišču bo povzročila spremembo energij teh orbital, ki tako ne bodo več degenerirane.



Slika 1: Kristal NaCl, kjer vsak atom natrija obkroža šest atomov klora z oktahedralno simetrijo.

Potencial naboja q v točki $(\pm d, 0, 0)$ je

$$V = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{r},$$

kjer je $r^2 = (x \pm d)^2 + y^2 + z^2$. V bližini izhodišča je $x, y, z \ll d$, zato lahko uporabimo razvoj

$$(1 \pm x)^{-1/2} \approx 1 \mp \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2 \mp \frac{5}{16}x^3 + \frac{35}{128}x^4$$

$$\begin{aligned} V_{\pm} &\propto \frac{1}{d} \left(1 \pm \frac{2x}{d} + \frac{r^2}{d^2} \right)^{-1/2} \approx \\ &\approx \frac{1}{d} \left[1 - \frac{1}{2} \left(\pm \frac{2x}{d} + \frac{r^2}{d^2} \right) + \frac{3}{8} \left(\pm \frac{2x}{d} + \frac{r^2}{d^2} \right)^2 - \frac{5}{16} \left(\pm \frac{2x}{d} + \frac{r^2}{d^2} \right)^3 + \frac{35}{128} \left(\pm \frac{2x}{d} + \frac{r^2}{d^2} \right)^4 + \mathcal{O}(r^5) \right] = \\ &= \frac{1}{d} \left(1 \mp \frac{x}{d} - \frac{r^2}{2d^2} + \frac{3x^2}{2d^2} + \frac{3r^4}{8d^4} \pm \frac{3xr^2}{2d^3} \mp \frac{15x^3}{24d^3} - \frac{15x^2r^2}{4d^4} + \frac{35x^4}{8d^4} \right) \end{aligned}$$

Seštejemo prispevka dveh od šestih sosedov

$$V_+ + V_- \propto \frac{1}{d} \left(2 - \frac{r^2}{d^2} + 3\frac{x^2}{d^2} + \frac{3r^4}{4d^4} - \frac{15x^2r^2}{2d^4} + \frac{35x^4}{4d^4} \right).$$

Analogno ravnamo še za ostale sosede. Skupen potencial je z nekaj truda

$$V = \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d} \left[6 + \frac{35}{4d^4} \left(x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5}r^4 \right) \right]$$

Člen $V_0 \propto \frac{6q}{d}$ je konstanta, zato ne vpliva na orientacijo orbit v središču, zato jo izpustimo

$$V_c = \frac{35}{4} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{1}{d^5} \left(x^4 + y^4 + z^4 - \frac{3}{5} r^4 \right).$$

Potencial lahko izrazimo s krogelnimi funkcijami. Upoštevamo transformacijo $x = r \cos \varphi \sin \vartheta$, $y = r \sin \varphi \sin \vartheta$, $z = r \cos \vartheta$ in dobimo za potencial

$$V_c = \frac{7\sqrt{\pi}}{3} \frac{q}{4\pi\epsilon_0} \frac{r^4}{d^5} \left[Y_4^0 + \sqrt{\frac{5}{14}} (Y_4^4 + Y_4^{-4}) \right],$$

kjer je

$$Y_4^0(\vartheta, \varphi) = \frac{3}{16\sqrt{\pi}} (3 - 30 \cos^2 \vartheta + 35 \cos^4 \vartheta)$$

$$Y_4^4(\vartheta, \varphi) = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{35}{2\pi}} \sin^4 \vartheta e^{i4\varphi}$$

$$Y_4^{-4}(\vartheta, \varphi) = \frac{3}{16} \sqrt{\frac{35}{2\pi}} \sin^4 \vartheta e^{-i4\varphi}$$

Potencialna energija elektrona, ki se nahaja blizu izhodišča je $-e_0 V_c$, od koder lahko izračunamo popravke k elektronskim orbitalam

$$\Delta \equiv \langle \psi | -e_0 V_c | \psi \rangle$$

Matrika, ki jo moramo diagonalizirati, je že diagonalna, če jo zapišemo v bazi

$$|3d_{z^2}\rangle = |320\rangle$$

$$|3d_{xy}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|322\rangle + |32-2\rangle)$$

$$|3d_{xy}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|322\rangle - |32-2\rangle)$$

$$|3d_{yz}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|321\rangle - |32-1\rangle)$$

$$|3d_{zx}\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}} (|321\rangle + |32-1\rangle).$$

Odvisnost od r v izrazu za V_c je samo v faktorju r^4 , zato si posebej izračunajmo

$$\langle r^4 \rangle = \int R_{32}^*(r) r^4 R_{32}(r) r^2 dr.$$

Formalno lahko torej integriramo radialni del in dobimo

$$\Delta = -\frac{e_0}{4\pi\epsilon_0} \frac{\langle r^4 \rangle}{d^5} \langle lm | \frac{7\sqrt{\pi}}{3} \left[Y_4^0 + \sqrt{\frac{5}{14}} (Y_4^4 + Y_4^{-4}) \right] | lm \rangle$$

Preostane nam le še integracija po kotu. Navedimo potrebne funkcije za integracijo

$$Y_2^2(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{+i2\varphi}$$

$$Y_2^1(\vartheta, \varphi) = -\frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{+i\varphi}$$

$$Y_2^0(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{5}{\pi}} (3 \cos^2 \vartheta - 1)$$

$$Y_2^{-1}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{2} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \cos \vartheta \sin \vartheta e^{-i\varphi}$$

$$Y_2^{-2}(\vartheta, \varphi) = \frac{1}{4} \sqrt{\frac{15}{2\pi}} \sin^2 \vartheta e^{-i2\varphi}$$

Za lastne energije dobimo:

$$|3d_{z^2}\rangle, |3d_{x^2-y^2}\rangle : \quad \Delta = \frac{3}{5} \Delta_0$$

$$|3d_{xy}\rangle, |3d_{yz}\rangle, |3d_{zx}\rangle : \quad \Delta = -\frac{2}{5} \Delta_0,$$

kjer je

$$\Delta_0 = -\frac{5e_0q}{12\pi\epsilon_0} \frac{\langle r^4 \rangle}{d^5}.$$

Veriga ionov

{Legenda: kar je v { } so vmesni računi, komentarji, nasveti,...}

1 Uvod

Če imamo izoliran atom, se energije ne razcepijo. Naš obravnavan ion pa se nahaja v potencialu ostalih ionov, zato se bodo energije d orbital razcepile.

2 Naloga

Rešujemo 1. nalogo iz 1. kolokvija iz Fizike kondenzirane snovi (20.4.2012) .

Navodilo:

Kristal je sestavljen iz med seboj šibko sklopljenih enodimenzionalnih verig ionov. Razdalja med sosednjima ionoma v verigi je a , naboji ionov pa alternirajo, $e_n = (-1)^n e_0$. Obravnavaj razcep orbital d na enem od ionov v kristalnem polju ostalih ionov v verigi.

(a) Izračunaj krajevno odvisnost coulombskega potenciala, ki ga čuti ion zaradi ostalih ionov v verigi. Ostale ione obravnavaj kot točkaste naboje. Potencial razvij le do vodilnega člena v Taylorjevem razvoju.

(b) Katere orbitale ostanejo degenerirane po razcepu v kristalnem polju. Računaj v bazi:

$$d_{xy}(\vec{r}) = xyf(r)$$

$$d_{xz}(\vec{r}) = xzf(r)$$

$$d_{yz}(\vec{r}) = yzf(r)$$

$$d_{x^2-y^2}(\vec{r}) = \frac{x^2 - y^2}{2} f(r)$$

$$d_{z^2}(\vec{r}) = \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{2\sqrt{3}} f(r)$$

kjer je realna funkcija $f(r)$ odvisna le od oddaljenosti od središča iona.

(c) Kako se razcepijo energije teh orbital? Rezultat izrazi s čimmanjšim številom integralov tipa $I_1 = \int x^2 y^2 z^2 f^2(r) dx dy dz, \dots$

3 (a) del naloge - razvoj potenciala

$$V = \frac{e}{4\pi\epsilon_0 r'}$$

$$r'^2 = x^2 + y^2 + (z \pm na)^2 = x^2 \pm 2zna + (na)^2 + y^2 + z^2 = r^2 \pm 2zna + (na)^2 \quad r' = \sqrt{r^2 \pm 2zna + (na)^2} = \sqrt{(na)^2(1 \pm \frac{2z}{na} + (\frac{r}{na})^2)} = na\sqrt{(1 \pm \frac{2z}{na} + (\frac{r}{na})^2)} = na\sqrt{(1 \pm [\frac{2z}{na} \pm (\frac{r}{na})^2])}$$

Vemo:

$$\frac{1}{\sqrt{1 \pm x}} \approx 1 \mp \frac{1}{2}x + \frac{3}{8}x^2$$

+ za ione, ki so v $-z$ (navzdol), - za ione, ki so v $+z$ (navzgor).

$$V_{\pm} = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \frac{1}{\sqrt{1 \pm [\frac{2z}{na} \pm (\frac{r}{na})^2]}}$$

$$V(x, y, z) = V_+ + V_- = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(\frac{1}{\sqrt{1 + [\frac{2z}{na} + (\frac{r}{na})^2]}} + \frac{1}{\sqrt{1 - [\frac{2z}{na} - (\frac{r}{na})^2]}} \right) =$$

Razvili bomo do 2. reda:

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(1 - \frac{1}{2} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right] + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right]^2 + 1 + \frac{1}{2} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right] + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right]^2 \right) =$$

Razpišemo oklepaje in kvadrate:

$$= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{2z}{na} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right]^2 + 1 + \frac{1}{2} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right] + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right]^2 \right) =$$

Poglejmo člen $\frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right]^2$:

$$\frac{3}{8} \left[\left(\frac{2z}{na} \right)^2 - 2 \left(\frac{2z}{na} \right) \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \left(\frac{r}{na} \right)^4 \right] \sim z^2 - zr^2 + r^4 \sim \underbrace{z^2}_{2.red} - \underbrace{zr^2}_{3.red} + \underbrace{r^4}_{4.red}$$

Kot smo že omenili bomo računali do vključno 2. reda. Torej je člen:

$$\begin{aligned} & \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} - \left(\frac{r}{na} \right)^2 \right]^2 \sim \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(1 - \frac{1}{2} \frac{2z}{na} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 + 1 + \frac{1}{2} \frac{2z}{na} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 \right) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(1 - \cancel{\frac{1}{2} \frac{2z}{na}} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 + 1 + \cancel{\frac{1}{2} \frac{2z}{na}} - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 \right) = \end{aligned}$$

Vidimo, da se nam je linearna odvisnost od z pokrajšala. Ker pa nas prav to zanima, razvijemo do 2. reda.

$$\begin{aligned} &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 + 1 - \frac{1}{2} \left(\frac{r}{na} \right)^2 + \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 \right) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(2 - \left(\frac{r}{na} \right)^2 + 2 \frac{3}{8} \left[\frac{2z}{na} \right]^2 \right) = \\ &= \sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} \left(2 - \frac{r^2 - 3z^2}{(na)^2} \right) = \\ &= \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 na} 2}_{\text{Mendelejeva konst??}} - \underbrace{\sum_{n=1}^{\infty} \frac{e_0(-1)^n}{4\pi\epsilon_0 (na)^3}}_{\lambda} (r^2 - 3z^2) \end{aligned}$$

Mendelejeva?? konstanta nas ne zanima, saj konstanta premakne vse orbitale za enako vrednost. kar bomo v nadaljevanju uporabili je:

$$\boxed{V(x, y, z) = \lambda(3z^2 - r^2)}$$

4 (b) del naloge

4.1 Baza

{ Lastne vrednosti se ne spremenijo, če spremenimo bazo. }

Imamo podano bazo. Zanima nas zakaj je ravno takšna?

Poglejmo primer na orbitalah p: $\Rightarrow l = 1 \Rightarrow m = -1, 0, 1 \Rightarrow |lm\rangle \Rightarrow$ imamo tri možnosti:

$$\begin{aligned} &|1\ 1\rangle \\ &|1\ 0\rangle \\ &|1\ -1\rangle \end{aligned}$$

ki jih lahko zapišemo s sferičnimi funkcijami kot:

$$\begin{aligned} |1\ 1\rangle &\rightarrow Y_{11}(\theta, \varphi) = \sin\theta e^{i\varphi} \\ |1\ 0\rangle &\rightarrow Y_{10}(\theta, \varphi) = \cos\theta \\ |1\ -1\rangle &\rightarrow Y_{1-1}(\theta, \varphi) = \sin\theta e^{-i\varphi} \end{aligned}$$

Ker pa bi raje delali z realnimi funkcijami kot s kompleksnimi, si izmislimo novo bazo:

Ohranimo $|1\ 0\rangle \rightarrow Y_{10}(\theta, \varphi) = \cos\theta$, ki jo označimo s $|p_z\rangle$, ostali dve pa seštejemo oz. odštejemo in dobimo $|p_x\rangle$ oz. $|p_y\rangle$:

$$\begin{aligned} \frac{|1\ 1\rangle + |1\ -1\rangle}{\sqrt{2}} &= \frac{\sin\theta e^{i\varphi} + \sin\theta e^{-i\varphi}}{\sqrt{2}} = \frac{\sin\theta \cos\varphi}{\sqrt{2}} \equiv |p_x\rangle \\ \frac{|1\ 1\rangle - |1\ -1\rangle}{i\sqrt{2}} &= \frac{\sin\theta e^{i\varphi} - \sin\theta e^{-i\varphi}}{i\sqrt{2}} = \frac{\sin\theta \sin\varphi}{\sqrt{2}} \equiv |p_y\rangle \end{aligned}$$

Dobili smo novo bazo, ki vsebuje realne funkcije:

$$\begin{aligned} &|p_x\rangle \\ &|p_y\rangle \\ &|p_z\rangle \end{aligned}$$

Na podoben način dobimo tudi bazo, ki nam je pri nalogi že dana.

4.2 Degeneracija orbital

V splošnem imamo matriko 5x5:

$$\begin{bmatrix} \langle xy|V|xy\rangle & \langle xy|V|xz\rangle & \langle xy|V|yz\rangle & \langle xy|V|x^2-y^2\rangle & \langle xy|V|z^2\rangle \\ \langle xz|V|xy\rangle & \langle xz|V|xz\rangle & \langle xz|V|yz\rangle & \langle xz|V|x^2-y^2\rangle & \langle xz|V|z^2\rangle \\ \langle yz|V|xy\rangle & \langle yz|V|xz\rangle & \langle yz|V|yz\rangle & \langle yz|V|x^2-y^2\rangle & \langle yz|V|z^2\rangle \\ \langle x^2-y^2|V|xy\rangle & \langle x^2-y^2|V|xz\rangle & \langle x^2-y^2|V|yz\rangle & \langle x^2-y^2|V|x^2-y^2\rangle & \langle x^2-y^2|V|z^2\rangle \\ \langle z^2|V|xy\rangle & \langle z^2|V|xz\rangle & \langle z^2|V|yz\rangle & \langle z^2|V|x^2-y^2\rangle & \langle z^2|V|z^2\rangle \end{bmatrix}$$

To matriko bi morali najprej diagonalizirati, nato pa dobiti lastne vrednosti. Pa poglejmo še prej, če so mogoče kateri elementi matrike enaki nič.

$$\{ |z^2\rangle = d_{z^2}(\vec{r}) = \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{2\sqrt{3}} f(\vec{r}) \text{ lahko zapišemo tudi kot: } \frac{2z^2 - x^2 - y^2}{2\sqrt{3}} = \frac{3z^2 - r^2}{2\sqrt{3}} \}$$

$\{ V f(r) \text{ so } x, y \text{ in } z \text{ sode funkcije. } \}$

V nadaljevanju bom spuščal konstante, ki so prisotne pri baznih funkcijah. Pa poglejmo:

$$\langle xy|V|xz\rangle = \int xyf(r)\lambda(3z^2 - r^2)xzf(r)dxdydz = -|| - \underbrace{\int ydy}_{=0} = 0$$

Integral je enak nič, ker integriramo LIHO funkcijo od $-\infty$ do $+\infty$.

$$\langle xy|V|yz\rangle = \int xyf(r)\lambda(3z^2 - r^2)xzf(r)dxdydz = -|| - \underbrace{\int xdx}_{=0} = 0$$

Ta člen je analogen prejšnjemu, saj je integral enak, le da se x in y zamenjata, kar pa je enako saj smo našo verigo obrnili v smeri z , torej je smer z privilegirana, x in y pa sta ENAKOvredno NEprivilegirani.

$$\begin{aligned} \langle xy|V|x^2 - y^2\rangle &= \int xyf(r)\lambda(3z^2 - r^2)(x^2 - y^2)f(r)dxdydz = -|| - \underbrace{\int x^3dx}_{=0} \underbrace{\int ydy}_{=0} - \\ &- || - \underbrace{\int xdx}_{=0} \underbrace{\int y^3dy}_{=0} = 0 \end{aligned}$$

$$\langle xy|V|z^2\rangle = \langle xy|V|3z^2 - r^2\rangle = \int xyf(r)\lambda(3z^2 - r^2)(3z^2 - r^2)f(r)dxdydz = -|| - \underbrace{\int xdx}_{=0} \underbrace{\int ydy}_{=0} = 0$$

Pri teh štirih smo uporabili enak argument.

$$\langle x^2 - y^2|V|z^2\rangle = \int \underbrace{(x^2 - y^2)}_{=0} f(r)\lambda(3z^2 - r^2)(3z^2 - r^2)f(r)dxdydz$$

Ker sta smeri x in y enakovredni.

Tako torej izračunamo še za vse ostale izvendiagonalne člene in ugotovimo, da so vsi enaki nič. Naša matrika se torej malo poenostavi:

$$\begin{bmatrix} \langle xy|V|xy \rangle & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & \langle xz|V|xz \rangle & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & \langle yz|V|yz \rangle & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & \langle x^2 - y^2|V|x^2 - y^2 \rangle & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \langle z^2|V|z^2 \rangle \end{bmatrix}$$

Torej je ne rabimo diagonalizirati, saj je že!

Poglejmo si sedaj diagonalne člene:

2. in 3. bazna funkcija:

$$2.: \quad \langle xz|V|xz \rangle = \int x^2 z^2 f(r)^2 \lambda(3z^2 - r^2) dx dy dz$$

$$3.: \quad \langle yz|V|yz \rangle = \int y^2 z^2 f(r)^2 \lambda(3z^2 - r^2) dx dy dz$$

Vidimo, da sta integrala enaka, saj smo že omenili, da sta smeri x in y enakovredni.

Torej:

$$\langle xz|V|xz \rangle = \langle yz|V|yz \rangle$$

1. in 4. bazna funkcija:

$$1.: \quad \langle xy|V|xy \rangle = \int x^2 y^2 f(r)^2 \lambda(3z^2 - r^2) dx dy dz$$

$$4.: \quad \langle x^2 - y^2|V|x^2 - y^2 \rangle = \int \left(\frac{x^2 - y^2}{2}\right)^2 f(r)^2 \lambda(3z^2 - r^2) dx dy dz$$

Poskusimo si NARISATI funkciji $x^2 y^2$ in $\left(\frac{x^2 - y^2}{2}\right)^2$.

Uvedemo u in v :

$$u = \frac{x+y}{\sqrt{2}}, \quad v = \frac{x-y}{\sqrt{2}} \quad \Rightarrow \quad x = \frac{u+v}{\sqrt{2}}, \quad y = \frac{u-v}{\sqrt{2}}, \quad dx dy = du dv$$

in v 4. bazno funkcijo vstavimo x in y in kar dobimo primerjamo s 1. bazno funkcijo:

$$1.: \quad \langle xy|V|xy \rangle = \int x^2 y^2 f(\vec{r})^2 \lambda(3z^2 - r^2) dx dy dz$$

$$4.: \quad \langle x^2 - y^2|V|x^2 - y^2 \rangle = \int u^2 v^2 f(\vec{r})^2 \lambda(3z^2 - r^2) du dv dz$$

Vidimo, da sta tudi ta dva integrala enaka, le druge oznake so druge.

Torej:

$$\langle xy|V|xy \rangle = \langle x^2 - y^2|V|x^2 - y^2 \rangle$$

5. bazna funkcija:

$$5.: \langle z^2 | V | z^2 \rangle = \int \frac{(3z^2 - r^2)}{2\sqrt{3}} f(r) \lambda (3z^2 - r^2) \frac{(3z^2 - r^2)}{2\sqrt{3}} f(r) dx dy dz = \int \frac{\lambda (3z^2 - r^2)^3 f^2(r)}{12} dx dy dz$$

Naša matrika se je spet malo poenostavila. Shematično:

$$\begin{bmatrix} A & 0 & 0 & 0 & 0 \\ 0 & B & 0 & 0 & 0 \\ 0 & 0 & B & 0 & 0 \\ 0 & 0 & 0 & A & 0 \\ 0 & 0 & 0 & 0 & C \end{bmatrix}$$

Vidimo torej, da sta "A" in "B" dvakrat degenerirani, kar nas je zanimalo.

5 (c) del naloge - kako se razcepijo energije orbital?

Izračunajmo sedaj A, B in C:

$$\begin{aligned} \langle xz | V | xz \rangle &= \int x^2 z^2 f^2(\vec{r}) \lambda (3z^2 - r^2) dx dy dz = \int x^2 z^2 f^2(\vec{r}) \lambda (2z^2 - x^2 - y^2) dx dy dz = \\ &= \lambda \int 2x^2 z^4 f^2(\vec{r}) dx dy dz - \lambda \int x^4 z^2 f^2(\vec{r}) dx dy dz - \lambda \int x^2 y^2 z^4 f^2(\vec{r}) dx dy dz = \\ &= \lambda \underbrace{\int 2x^2 z^4 f^2(\vec{r}) dx dy dz}_{2I_1} - \lambda \underbrace{\int x^4 z^2 f^2(\vec{r}) dx dy dz}_{I_1} - \lambda \underbrace{\int x^2 y^2 z^4 f^2(\vec{r}) dx dy dz}_{I_2} = \\ &= 2I_1 - I_1 - I_2 = I_1 - I_2 \end{aligned}$$

Tu smo upoštevali, da sta integrala enaka, saj se oznaki x in z le zamenjata.

$$\langle xy | V | xy \rangle = 2(I_2 - I_1)$$

Poglejmo, če se da izraziti I_2 z I_1 :

$$I_2 = \lambda \int x^2 y^2 z^2 f^2(\vec{r}) dx dy dz =$$

Spet na enak način uvedemo u in v :

$$xy = \frac{1}{2}(u+v)(u-v) = \frac{1}{2}(u^2 - v^2) \Rightarrow$$

$$\begin{aligned} I_2 &= \lambda \int \frac{1}{4}(u^2 - v^2)^2 z^2(\vec{r}) dx dy dz = \lambda \int \left(\frac{1}{4}u^4 - \frac{1}{2}u^2v^2 + \frac{1}{4}v^4 \right) z^2(\vec{r}) dx dy dz = \\ &= \frac{1}{4}I_1 - \frac{1}{2}I_2 + \frac{1}{4}I_1 = \frac{1}{2}I_1 - \frac{1}{2}I_2 \end{aligned}$$

Torej:

$$I_2 = \frac{1}{3}I_1$$

Podobno še za $z^2|V|z^2 >$, kjer dobimo nekaj podobnega: $I_3 = \lambda \int x^6 f^2(r) dx dy dz$. I_3 potem spet lahko izrazimo z I_1 .

Del V

Magnetizem

HEISENBERGOV MODEL

lastne funkcije in energije za model štirih spinov $\rightarrow$  } 16 možnih konfiguracij: matrika 16×16 $\rightarrow$ preči Hammetna diagonalizacija

Hamiltonian za izotropni Heisenbergov model: $H = J \sum_{i=1}^4 \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}$

Poiščemo operatore, ki komutirajo in delamo s tako bazo.

Operator celotnega spina $\vec{S} = \sum_{i=1}^4 \vec{S}_i$ komutira s H :

$$[H, \vec{S}]_{\alpha} = [H, S_{\alpha}] = [J \sum_{i,j,\beta} S_{i\beta} S_{j\beta}, \sum_{j,\beta} S_{j\alpha}] = J \sum_{i,j,\beta} ([S_{i\beta}, S_{j\alpha}] S_{i\beta} + S_{i\beta} [S_{i\beta}, S_{j\alpha}]) =$$

$$= J \sum_{i,j,\beta,\gamma} i\hbar (\delta_{ij} \epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_{i\gamma} S_{j\beta} + S_{i\beta} \delta_{ij} \epsilon_{\beta\alpha\gamma} S_{i\gamma}) = i\hbar J \sum_{i,\beta,\gamma} S_{i\beta} S_{i\gamma} (\epsilon_{\beta\alpha\gamma} + \epsilon_{\gamma\alpha\beta}) = 0$$

H, S^2, S_z in T (operator translacije) komutirajo med seboj.

$\hookrightarrow$ premešalne spine na eno mesto naprej: $T|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$

Lahko najdemo lastne funkcije, ki so lastne funkcije vseh štirih operatorjev: ψ

$$\begin{aligned} \hat{S}_z |\psi\rangle &= S_z |\psi\rangle \\ S^2 |\psi\rangle &= S(S+1) |\psi\rangle \\ T |\psi\rangle &= e^{ika} |\psi\rangle \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} a &= 1 \\ \hbar &= 1 \end{aligned}$$

ψ - lastna funkcija

$$\text{ker } T^4 |\psi\rangle = e^{i4k} |\psi\rangle = |\psi\rangle : k = n\frac{\pi}{2} \in \{0, \frac{\pi}{2}, \pi, \frac{3\pi}{2}\}$$

Kvantna števila bodo: S, S_z in k

PRODUKTNA BAZA (ta stanja ne imajo dobri celotni S_z)

$$S_z = 2 : |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$

$$S_z = 1 : |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$$

$$S_z = 0 : |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle, |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle, |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$S_z = -1 : |\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle, |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle$$

$$S_z = -2 : |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$$

Stanje $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ ima tudi dober $S=2$ (ne more biti manjši od 2, naj bi $S_z=2$, niti večji, naj imamo le 4 spine) in dober $k=0$

$$(T|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle), \text{ torej } |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |220\rangle$$

Četala stanja s $S=2$ dobim tako, da na $|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ delujem s operatorjem S_- :

$$\begin{aligned} S_{\pm} &= S_x \pm iS_y \\ S_- |\uparrow\rangle &= |\downarrow\rangle \\ S_- |\downarrow\rangle &= 0 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} S_- |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle &= \sum_{i=1}^4 S_- |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle = S_- |220\rangle = \\ &= \sqrt{S(S+1) - S_z(S_z-1)} |210\rangle = 2 |210\rangle \end{aligned}$$

$$|210\rangle = \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

$$S_- |210\rangle = \sqrt{2(2+1) - 1(1-1)} |200\rangle = \sqrt{6} |200\rangle = \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle)$$

$$|200\rangle = \frac{1}{\sqrt{6}} (|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

$$|2-10\rangle = \frac{1}{2} (|\uparrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle)$$

$$|2-20\rangle = |\downarrow\downarrow\downarrow\downarrow\rangle$$

preostali dve lahko
lahko še najdemo

Kolaj imamo že
5 stanj, še 11!

Matrični elementi med stanji, ki se razlikujejo vsaj enim kvantnim številom, so nič! ②

$$\text{primer: } \langle SS_z k | [H, S_z] | S' S'_z k' \rangle = \langle SS_z k | H S_z | S' S'_z k' \rangle - \langle SS_z k | S_z H | S' S'_z k' \rangle =$$

$$= (S'_z - S_z) \langle SS_z k | H | S' S'_z k' \rangle \xrightarrow{\text{komutator je nič}} = 0$$

Če $S'_z \neq S_z$, potem je matrični element nič (in podobno za $S'_m \neq S_m$)

Pokažemo lahko, da sta energiji stanj $|SS_z k\rangle$ in $S_- |SS_z k\rangle$ enaki, isto velja za $S^2 |SS_z k\rangle$ in $S^2 |SS_z k\rangle$. Seveda iz $[T, S_-] = 0$ in $[S^2, S_-] = 0$

$$[H, S_-] = [H, S_x - iS_y] = 0$$

$$[H, S_-] |SS_z k\rangle = 0 = H S_- |SS_z k\rangle - S_- H |SS_z k\rangle = H (S_- |SS_z k\rangle) - E(SS_z k) (S_- |SS_z k\rangle)$$

Schrödingerjeva enačba $H|\psi\rangle = E|\psi\rangle$

Vidimo, da so tako stanja degenerirana, torej bo izražen $H|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$ nadstoval za vse ostale.

$$H|\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = J \sum_{i=1}^4 [S_i^z S_{i+1}^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+)] |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = J \sum_{i=1}^4 \frac{1}{2} \cdot \frac{1}{2} |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = \frac{1}{4} J 4 |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = J |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle$$

Iz produktnih stanj za $S_z = 1$ tvorimo stanja za določen k :

$$|\Psi\rangle = \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{ik} |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{2ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{3ik} |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \rightarrow \text{Blochova stanja}$$

$$T|\Psi\rangle = e^{ik} |\Psi\rangle$$

$$\begin{aligned} |11-\frac{\pi}{2}\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ |11\frac{\pi}{2}\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \\ |11\pi\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) \end{aligned}$$

Funkcija za $k=0$ pa je
še naprej ena 1210

Stanja za nižjim S_z spet dobimo tako, da delujemo z S_- :

$$S_- |11k\rangle = \sqrt{2} |10k\rangle = \frac{1}{2} \left(\begin{aligned} &|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{ik} |\downarrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{2ik} |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{3ik} |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle + \\ &+ |\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{ik} |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{2ik} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + e^{3ik} |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \\ &+ |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{2ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + e^{3ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle \end{aligned} \right) =$$

$$= \frac{1}{2} \left[(1+e^{ik}) (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{ik} |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + e^{2ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{3ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) + (1+e^{2ik}) (|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + e^{ik} |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \right]$$

$$\begin{aligned} |10-\frac{\pi}{2}\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \\ |10\frac{\pi}{2}\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + i|\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle - i|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle) \\ |10\pi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle) \end{aligned}$$

Poznamo tudi stanja $|1-1-\frac{\pi}{2}\rangle$,
 $|1-1\frac{\pi}{2}\rangle$ in $|1-1\pi\rangle$ (lahko delujemo
z S_- na $|10k\rangle$ ali pa namenjamo $\uparrow$ in $\downarrow$ na
 $|11k\rangle$).

Kolaj imamo še 5+9 stanj, še 2!

Stanja z $S_z = -1, 0, 1$ imajo enako energijo - enomagnonska valujna stanja FM:

$$E(S=1, S_z, k) = E(S=2, S_z, 0) - J \sin^2 \frac{k}{2} = J \left(1 - \sin^2 \frac{k}{2} \right) \xrightarrow{k=\pi} 0$$

$\xrightarrow{k=\pm\frac{\pi}{2}} J/2$

Preostali 2 stanja imata $S_z = 0$ (imamo na $|200\rangle, |10-\frac{\pi}{2}\rangle, |10\frac{\pi}{2}\rangle, |10\pi\rangle$). Iz restih produktih stanj $S_z = 0$ lahko tvorim šest stanj z dobim k :

$$\left. \begin{aligned} |a\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) & k=0 \\ |b\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) & k=\frac{\pi}{2} \rightarrow |10\frac{\pi}{2}\rangle \\ |c\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) & k=\pi \rightarrow |00\pi\rangle \\ |d\rangle &= \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle - |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) & k=-\frac{\pi}{2} \rightarrow |10-\frac{\pi}{2}\rangle \\ |e\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) & k=0 \\ |f\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) & k=\pi \rightarrow |10\pi\rangle \end{aligned} \right\} \begin{array}{l} \uparrow \quad \uparrow \\ \downarrow \quad \downarrow \\ \uparrow \quad \downarrow \\ \downarrow \quad \uparrow \end{array}$$

Iz stanj $|a\rangle$ in $|e\rangle$ tvorim $|200\rangle$: $|200\rangle = \frac{2|a\rangle + \sqrt{2}|e\rangle}{\sqrt{6}}$

ortogonalno stanje je $|000\rangle$: $|000\rangle = \frac{\sqrt{2}|a\rangle - 2|e\rangle}{\sqrt{6}}$

(Kajaj $S=0$? $|a\rangle$ in $|e\rangle$ imata k in $S_z=0$,
za $S=1$ pa bi dobili 3 stanja (ne potrebujemo)
tako, zato je edina možnost $S=0$)

$$|000\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

Stanje $|c\rangle$ se ne meša z $|000\rangle$ ali $|200\rangle$, saj ima drugačen k ($|c\rangle = |00\pi\rangle$) ($S=0$ in istega razloga) kot $|a\rangle$ in $|e\rangle$.

$$|00\pi\rangle = \frac{1}{2} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle - |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

Izračunajmo energije $|a\rangle$ in $|e\rangle$:

$$\frac{J}{2} \sum (S_i^+ S_{i+1}^- + S_i^- S_{i+1}^+)$$

energije $|c\rangle$ ne računamo, saj
za nas ni zanimiva

$$H|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle = J \cdot \left(\frac{1}{4} - \frac{1}{4} + \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \right) |\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + \frac{1}{2} J (|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

in enako za $H|\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle, H|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle, H|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$

$$H|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle = J \cdot \left(-\frac{1}{4} - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \right) |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle + \frac{1}{2} J (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle)$$

in enako za $H|\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle$

torej: $H|a\rangle = \sqrt{2}J|e\rangle$

$$(H \cdot 2|a\rangle = \frac{1}{2} J \cdot 4 \cdot \sqrt{2}|e\rangle)$$

$$H|e\rangle = -J|e\rangle + \sqrt{2}J|a\rangle \quad (H\sqrt{2}|e\rangle = -J\sqrt{2}|e\rangle + \frac{1}{2}J \cdot 4|a\rangle)$$

$$\begin{pmatrix} \langle a|H|a\rangle & \langle a|H|e\rangle \\ \langle e|H|a\rangle & \langle e|H|e\rangle \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 & \sqrt{2}J \\ \sqrt{2}J & -J \end{pmatrix} \rightarrow \text{lastne vrednosti: } E^2 + JE - 2J^2 = 0$$

$$E = \frac{-J \pm 3J}{2} = \left\{ J, -2J \right\}$$

lastni vektor $\begin{pmatrix} 1 \\ \sqrt{2} \end{pmatrix}$ lastni vektor $\begin{pmatrix} -\sqrt{2} \\ 1 \end{pmatrix}$

Stanje $|200\rangle$ ima energijo J , stanje $|000\rangle$ pa energijo $-2J$.

za $J < 0$ (FM): osnovno stanje ima $E = J$ in je $|\Psi\rangle = |\uparrow\uparrow\uparrow\uparrow\rangle = |220\rangle$ (povsem degenerirano)

za $J > 0$ (AFM): osnovno stanje ima $E = -2J$ in je $|\Psi\rangle = \frac{1}{\sqrt{12}} (|\downarrow\downarrow\uparrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\uparrow\downarrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle) - \frac{1}{\sqrt{3}} (|\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow\rangle + |\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle) = |000\rangle$

Vidimo, da osnovno stanje antiferomagneta nima le kombinacije $|\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\rangle$ in $|\downarrow\uparrow\uparrow\downarrow\rangle$, temveč tudi ostale člane, ki jih ne bi ravno pripirali antiferomagnetu.

Feromagnet v približku povprečnega polja

Fizika kondenzirane snovi

Jure Aplinc

4. april 2012

1 Naloga

Obravnavajmo feromagnet v približku povprečnega polja za delce s spinom j . Zanimali nas bosta magnetizacija $\mathcal{M}$ pri $T > 0$ in magnetna susceptibilnost χ nad kritično temperaturo T_c .

2 Heisenbergov model in približek povprečnega polja

Interakcijo v feromagnetu opišemo z Heisenbergovim modelom

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + g_0 \mu_b \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}_0. \quad (1)$$

Simbol $\langle ij \rangle$ pove, da obravnavamo povezave med najbližjimi sosedi $i - j$ (natanko enkrat (indeks j pa preteke vse te povezave z sosedi)). Tega hamiltoniana ne znamo rešiti v splošnem zato naredimo približek povprečnega polja, kjer se znebimo produkta operatorjev spina:

$$\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = \langle \mathbf{s}_i \rangle \mathbf{s}_j + \mathbf{s}_i \langle \mathbf{s}_j \rangle - \langle \mathbf{s}_i \rangle \langle \mathbf{s}_j \rangle. \quad (2)$$

Produkt $\langle \mathbf{s}_i \rangle \langle \mathbf{s}_j \rangle$ prispeva zgolj k energiji, k magnetizaciji in susceptibilnosti pa ne, zato ga bomo odstranili iz nadaljne obravnave.

$$\mathcal{H} = -J \sum_{\langle ij \rangle} (\langle \mathbf{s}_i \rangle \mathbf{s}_j + \mathbf{s}_i \langle \mathbf{s}_j \rangle) + g_0 \mu_b \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}_0 \quad (3)$$

Indeksa i in j lahko v prvem delu hamiltoniana zamenjamo, saj sta nena, tako dobimo $2 \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \langle \mathbf{s}_j \rangle$. Vsoto po $\langle ij \rangle$ razpišemo na dve vsoti, prva teče po i , druga pa po najbližjih sosedih $i - j$. S tem smo vsako povezavo šteli dvakrat, odtod $1/2$. Predpostavimo tudi, da vsi spini v kristalu kažejo v isto smer in zapišemo $\langle \mathbf{s}_j \rangle = \langle \mathbf{s} \rangle$.

$$\mathcal{H} = \sum_i \mathbf{s}_i g_0 \mu_b \left(-\frac{J}{g_0 \mu_b} \sum_{j \text{ n.s. } i} \langle \mathbf{s} \rangle + \mathbf{B}_0 \right) \quad (4)$$

Raje kot z spinom delajmo s magnetizacijo $\mathbf{M} = N/V \langle \vec{\mu} \rangle$; $\vec{\mu} = -g_0 \mu_b \mathbf{s}$ ¹ Heisenbergov model se tedaj zapiše takole:

$$\mathcal{H} = \sum_i g_0 \mu_b \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}_{ef}; \quad \mathbf{B}_{ef} = \left(\frac{JzV}{g_0^2 \mu_b^2 N} \mathbf{M} + \mathbf{B}_0 \right). \quad (5)$$

Hamiltonian sedaj izgleda podobno hamiltonianu, ki smo ga imeli pri paramagnetizmu, zato lahko magnetizacijo izračunam na enak način kot tam.

$$\mathbf{M} = \frac{N}{V} g_0 \mu_b j B_j(\beta g_0 \mu_b j \|\mathbf{B}_{ef}\|) \frac{\mathbf{B}_{ef}}{\|\mathbf{B}_{ef}\|} \quad (6)$$

¹ $\vec{\mu}$ označuje vektor magnetnega momenta. V tekstu so ostali vektorji sicer označeni odebeljeno.

Z B_j smo označili j – to Brilluinovo funkcijo:

$$B_j(x) = \frac{2j+1}{2j} \coth\left(\frac{2j+1}{2j}x\right) - \frac{1}{2j} \coth\left(\frac{1}{2j}x\right) \approx \frac{(2j+1)^2-1}{12j^2}x - \frac{(2j+1)^4-1}{720j^4}x^3 + \mathcal{O}(x^5) \quad (7)$$

Iz enačbe (6) želimo izračunati magnetizacijo $\mathbf{M}$, kar pa ni analitično mogoče, saj dobimo transcendentno enačbo za M , zato B_j razvijemo za majhne argumente (sedaj je naša rešitev omejena zgolj na majhna polja in magnetizacijo v bližini kritične temperature, ali pa na velike temperature). V razvoju (7) smo uporabili le razvoj $\coth$ za majhne argumente

$$\coth x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3} - \frac{x^3}{45} + \dots \quad (8)$$

Prvi red se nam pokrajša, tako, da moramo razviti najmanj do drugega reda.

3 Spontana magnetizacija

Poglejmo magnetizacijo pri pogoju, da je zunanjo magnetno polje $\mathbf{B}_0 = 0$. Tedaj iz enačb (6) in (7) hitro dobimo

$$M = \alpha \left[\frac{(2j+1)^2-1}{12} \beta \kappa M - \frac{(2j+1)^4-1}{720} \beta^3 \kappa^3 M^3 \right], \quad (9)$$

kjer smo označili $\alpha = g_0 \mu_b N/V$ in $\kappa = JzV/(g_0 \mu_b N)$. Takoj dobimo trivialno rešitev $M = 0$, bolj pa nas zanimajo netrivialne. Če skiciramo desno in levo stran enačbe (9) na isti graf in grafično iščemo rešitev vidimo, da bomo dobili presečišče obeh strani le tedaj ko bo koeficient pred linearnim členom večji kvečjemu enak 1, kar je naklon leve strani. Če bo naklon manjši bo desna stran vselej pod levo, presečišča in rešitve pa tako ne bo! Naklon desne strani je odvisen od temperature, če je ta naklon tak, da ravno dobimo netrivialno rešitev, to temperaturo imenujemo kritična temperatura.

$$\alpha \frac{(2j+1)^2-1}{12} \beta \kappa = 1 \quad \Rightarrow \quad T_c = \frac{Jz j(j+1)}{k_b 3}. \quad (10)$$

Sedaj se zanimamo le za netrivialno rešitev zato lahko delimo z M in rešimo kvadratno enačbo. Hitro dobimo

$$M = \pm \sqrt{\frac{5}{12} \frac{N}{V} g_0 \mu_b \frac{4j(j+1)}{\sqrt{(2j+1)^2+1}}} \sqrt{\frac{T^2(T_c - T)}{T_c^3}}. \quad (11)$$

Ko smo razvijali Brilluinovo funkcijo smo rekli, da morata biti polje in magnetizacija majhna ali pa temperatura zelo visoka. Slednje nas ne zanima, saj tedaj ne dobimo netrivialne rešitve za magnetizacijo. Naša obravna bo torej omejena na območje okrog kritične temperature $T \approx T_c$, saj bo tam polje majhno. Tako lahko enačbo (11) preoblikujemo

$$M = \pm \sqrt{\frac{5}{12} \frac{N}{V} g_0 \mu_b \frac{4j(j+1)}{\sqrt{(2j+1)^2+1}}} \sqrt{\frac{(T_c - T)^2 - T_c(T_c - T) + T_c^2}{T_c^3}} (T_c - T), \quad (12)$$

kjer bomo zanemarili vse kar ni prvega reda v $(T_c - T)$, saj je razlika majhna. Tako dobimo

$$M = \pm \sqrt{\frac{5}{12} \frac{N}{V} g_0 \mu_b \frac{4j(j+1)}{\sqrt{(2j+1)^2+1}}} \sqrt{\frac{T_c - T}{T_c}}. \quad (13)$$

Kot vidimo magnetizacija pada (oziroma narašča, odvisno od rešitve) korensko (v okolici kritične temperature, kjer naša aproksimacija velja) proti 0, ki jo doseže pri temperaturi T_c . Za vse temperature večje od T_c dobimo le trivialno rešitev. Ko smo pod kritično temperaturo je energijsko bolj ugodno, ako se sistem nahaja v eni od netrivialnih rešitev in ne v trivialni $M = 0$.

4 Magnetna susceptibilnost

Vključimo sedaj še zunanje magnetno polje $\mathbf{B}_{ef}$. V tem primeru bomo magnetizacijo razvili le do prvega reda in dobili:

$$M = \alpha \frac{j(j+1)}{3} \left(\beta \frac{JzV}{g_0\mu_b N} M + \beta g_0\mu_b B_0 \right). \quad (14)$$

Odtod izrazimo magnetizacijo, kar je trivialno, hkrati pa enačbo olepšamo tako, da nekaj konstant nadomestimo z T_c . Tedaj dobimo za magnetizacijo

$$M = \frac{N}{V} g_0^2 \mu_b^2 \frac{j(j+1)}{3k_b} \frac{B_0}{T - T_c} \quad (15)$$

Mi želimo imeti magnetno susceptibilnost, ki jo izračunamo iz magnetizacije (15) po formuli, ki jo dobro poznamo

$$\chi = \mu_0 \left. \frac{\partial M}{\partial B_0} \right|_{B_0 \rightarrow 0}. \quad (16)$$

Tako, da dobimo

$$\chi = \mu_0 \frac{N}{V} g_0^2 \mu_b^2 \frac{j(j+1)}{3k_b} \frac{1}{T - T_c} = \frac{C}{T - T_c}, \quad (17)$$

kar imenujemo Curie-Weissov zakon. Kot vidimo susceptibilnost divergira pri T_c . Naša rešitev opisuje susceptibilnost za temperature nad kritično temperaturo, saj smo magnetizacijo razvili do 1. reda. Če pa bi jo razvili do drugega reda bi lahko gledali susceptibilnost tudi za temperature nižje od kritične temperature.

Ferimagnet v približku povprečnega polja

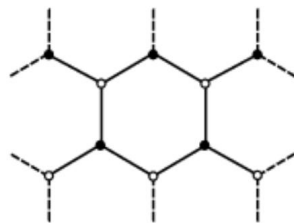
Fizika kondenzirane snovi

Jure Aplinc

11. april 2012

1 Naloga

Denimo, da imamo kristal z dvema vrstama ionov, ki imajo različen spin. Mreži, ki jo bomo obravnavali pravimo bipartitna mreža (na sliki 1 je prikazan en primer takšne mreže). Naša naloga je izračunati



Slika 1: Na sliki vidimo bipartitno mrežo ferimagneta, ki je sestavljena iz dveh vrst ionov, ki imajo različen spin.

magnetizacijo in magnetno susceptibilnost za takšen model.

2 Heisenbergov model za bipartitno mrežo v približku povprečnega polja

Ferimagnet opišimo z izotropnim Heisenbergovim modelom

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j + g_0 \mu_b \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}_0. \quad (1)$$

Simbol $\langle ij \rangle$ pove, da obravnavamo povezave med najbližjimi sosedi i – ja natanko enkrat (indeks j pa preteče vse te povezave z sosedi). Tega hamiltoniana ne znamo rešiti v splošnem zategadelj napravimo približek povprečnega polja, kjer se znebimo produkta operatorjev spina:

$$\mathbf{s}_i \cdot \mathbf{s}_j = \langle \mathbf{s}_i \rangle \mathbf{s}_j + \mathbf{s}_i \langle \mathbf{s}_j \rangle - \langle \mathbf{s}_i \rangle \langle \mathbf{s}_j \rangle. \quad (2)$$

Produkt $\langle \mathbf{s}_i \rangle \langle \mathbf{s}_j \rangle$ prispeva zgolj k energiji, k magnetizaciji in susceptibilnosti pa ne, zato ga bomo odstranili iz nadaljne obravnave.

$$\mathcal{H} = J \sum_{\langle ij \rangle} (\langle \mathbf{s}_i \rangle \mathbf{s}_j + \mathbf{s}_i \langle \mathbf{s}_j \rangle) + g_0 \mu_b \sum_i \mathbf{s}_i \cdot \mathbf{B}_0 \quad (3)$$

Indeksa i in j lahko v prvem delu hamiltoniana zamenjam, saj sta noma, tako dobim $2 \sum_{\langle ij \rangle} \mathbf{s}_i \langle \mathbf{s}_j \rangle$. Vsoto po $\langle ij \rangle$ razpišemo na dve vsoti, prva teče po i , druga pa po najbližjih sosedih i – ja. S tem smo vsako

povezavo šteli dvakrat, odtod $1/2$. Predpostavimo, da vsi spini v kristalni podmreži z ioni tipa A in prav tako B kažejo vsi v isto smer (ta smer pa ni nujno enaka za obe podmreži). Tako je povprečen spin $\langle \mathbf{s}_j \rangle$ bodisi $\langle \mathbf{s}_A \rangle$, bodisi $\langle \mathbf{s}_B \rangle$, odvisno od tega v kateri podmreži se nahaja j -ti spin. Tako nam vsota po najbližjih sosedih razpade na dve vsoti, prva teče po vseh ionih v podmreži A, ki imajo za sosede le delce v podmreži B, druga pa po ionih tipa A, ki imajo za sosede le ione tipa B.

$$\mathcal{H} = \sum_{i \in A} \mathbf{s}_i g_0 \mu_b \left(\frac{J}{g_0 \mu_b} \sum_{j \text{ n.s. } i} \langle \mathbf{s}_B \rangle + \mathbf{B}_0 \right) + \sum_{i \in B} \mathbf{s}_i g_0 \mu_b \left(\frac{J}{g_0 \mu_b} \sum_{j \text{ n.s. } i} \langle \mathbf{s}_A \rangle + \mathbf{B}_0 \right) \quad (4)$$

Vsota po najbližjih sosedih na primer iona A sešteje z_B enakih povprečnih spinov iona B tako, da se hamiltonijan preoblikuje v

$$\mathcal{H} = \sum_{i \in A} \mathbf{s}_i g_0 \mu_b \left(\frac{J z_B}{g_0 \mu_b} \langle \mathbf{s}_B \rangle + \mathbf{B}_0 \right) + \sum_{i \in B} \mathbf{s}_i g_0 \mu_b \left(\frac{J z_A}{g_0 \mu_b} \langle \mathbf{s}_A \rangle + \mathbf{B}_0 \right). \quad (5)$$

Povprečen spin substituimo z magnetizacijo¹ ker nam bo to v nadalje koristilo

$$\mathbf{M}_A = -\frac{g_A \mu_b N}{V} \langle \mathbf{s}_A \rangle, \quad \mathbf{M}_B = -\frac{g_B \mu_b N}{V} \langle \mathbf{s}_B \rangle. \quad (6)$$

Uvedemo tudi permeabilnosti μ^A in μ^B

$$\mu^A \mu_0 = \frac{J z_A V}{g_A g_B \mu_B^2 N}, \quad \mu^B \mu_0 = \frac{J z_B V}{g_A g_B \mu_B^2 N} \quad (7)$$

in efektivno magnetno polje

$$\mathbf{B}_A^{eff} = \mathbf{B}_0 - \mu_0 \mu^B \mathbf{M}_B, \quad \mathbf{B}_B^{eff} = \mathbf{B}_0 - \mu_0 \mu^A \mathbf{M}_A. \quad (8)$$

Tedaj naš hamiltonijan izgleda takole

$$\mathcal{H} = \sum_{i \in A} g_A \mu_B \mathbf{S}_i \mathbf{B}_A^{eff} + \sum_{i \in B} g_B \mu_B \mathbf{S}_i \mathbf{B}_B^{eff}. \quad (9)$$

Zgornji hamiltonian je podoben hamiltonianu, ki smo ga imeli pri paramagnetizmu zato magnetizacijo lahko izračunamo s pomočjo Brillouinovih funkcij.

$$\mathbf{M}_A = \frac{g_A \mu_B N_A j_A}{V} B_{j_A} \left(\frac{g_A \mu_B j_A B_A^{eff}}{k_b T} \right) \frac{\mathbf{B}_A^{eff}}{\|\mathbf{B}_A^{eff}\|} \quad (10)$$

in podobno za $\mathbf{M}_B$. Ako sedaj poskušamo izračunati obe magnetizaciji dobimo dve transcendentni enačbi, ki ju analitično ne moremo rešiti. Zato se omejimo zgolj na majhna polja (na okolico T_c) ali pa na velike temperature in razvijmo Brillouinovo funkcijo za male argumente.

$$B_j(x) = \frac{2j+1}{2j} \coth \left(\frac{2j+1}{2j} x \right) - \frac{1}{2j} \coth \left(\frac{1}{2j} x \right) \approx \frac{(2j+1)^2 - 1}{12j^2} x - \frac{(2j+1)^4 - 1}{720j^4} x^3 + \mathcal{O}(x^5) \quad (11)$$

S pomočjo zgornjega razvoja do 2. reda v magnetizaciji izpeljemo enačbi za magnetizacijo, kjer bomo označili $C_A = N_A g_A^2 j_A (j_A + 1) \mu_B^2 \mu_0 / 3 k_b V$, $C_B = N_B g_B^2 j_B (j_B + 1) \mu_B^2 \mu_0 / 3 k_b V$, $\Xi_A = [(2j_A + 1)^4 - 1] g_A^4 \mu_B^4 N_A \mu_0 / 720 V k_b^3$ in $\Xi_B = [(2j_B + 1)^4 - 1] g_B^4 \mu_B^4 N_B \mu_0 / 720 V k_b^3$.

$$\mathbf{M}_A = \frac{C_A \mu^B}{T} \mathbf{B}_A^{eff} - \Xi_A \frac{(\mu^B)^3}{T^3} \|\mathbf{B}_A^{eff}\|^2 \mathbf{B}_A^{eff}, \quad \mathbf{M}_B = \frac{C_B \mu^A}{T} \mathbf{B}_B^{eff} - \Xi_B \frac{(\mu^A)^3}{T^3} \|\mathbf{B}_B^{eff}\|^2 \mathbf{B}_B^{eff} \quad (12)$$

¹Tako kot smo to naredili pri nalogi "Feromagnet v približku povprečnega polja"

3 Kritična temperatura

Postavimo zunanje polje $\mathbf{B}_0$ na 0 in pogledimo zgornji enačbi. Najbolje je, da si skiciramo obe enačbi na isti graf in raziščemo kdaj sploh lahko dobimo netrivialne rešitve. Podobno kot pri nalogi "Feromagnet v približku povprečnega polja" mora biti začetna strmina obeh krivulj dovolj velika, da sploh dobimo presečišče. Mejno vrednost pri kateri ravno dobimo netrivialno rešitev izračunamo takole:

$$\det \begin{pmatrix} T_c & -C_A \mu^B \\ -C_B \mu^A & T_c \end{pmatrix} = 0. \quad (13)$$

Odtod dobimo kritično temperaturo $T_c = \sqrt{C_A C_B \mu^A \mu^B}$.

4 Magnetna susceptibilnost

Iz enačb 12 bomo izračunali magnetno susceptibilnost. Vzemimo obe enačbi razviti le do prvega reda v magnetizaciji, magnetno susceptibilnost izračunamo takole $\chi_A = \mu_0 \left. \frac{\partial \mathbf{M}_A}{\partial \mathbf{B}_0} \right|_{B_0 \rightarrow 0}$ in podobno za B . Tako dobimo

$$\chi_A = \frac{C_A}{T} (\mathbf{1} - \mu^B \chi_B), \quad \chi_B = \frac{C_B}{T} (\mathbf{1} - \mu^A \chi_A) \quad (14)$$

sistem dveh tenzorskih enačb, ki ga rešimo z ustavljanjem ene v drugo. Rešitvi sta

$$\chi_A = \frac{C_A T - T_C^2 / \mu^A}{T^2 - T_C^2} \mathbf{1} \quad \text{in} \quad \chi_B = \frac{C_B T - T_C^2 / \mu^B}{T^2 - T_C^2} \mathbf{1}. \quad (15)$$

Nas ne zanimata susceptibilnosti posameznih pod mrež ampak susceptibilnost kristala, zato seštejemo obe parcialni.

$$\chi = \frac{(C_A + C_B) T - (1/\mu^A + 1/\mu^B) T_C^2}{T^2 - T_C^2} \mathbf{1} \quad (16)$$

Vidimo, da ima χ , ki velja zgolj za $T > T_C$, divergenco pri T_C .

Poglejmo si še poseben primer, ko so ioni v obeh pod mrežah enaki in velja $C_A = C_B = C$ in $\mu^A = \mu^B = \mu$. Tedaj dobimo za susceptibilnost

$$\chi_{af} = \frac{2C}{T + T_C} \mathbf{1}, \quad (17)$$

ki pa očitno nima več divergences pri $T = T_C$. Oblika susceptibilnosti, ki smo jo dobili je značilna za antiferomagnete (spomnimo se, da smo na začetku vzeli Heisenbergov model za antiferomagnet s tem, ko smo izbrali drugačen predznak v hamiltonjanu).

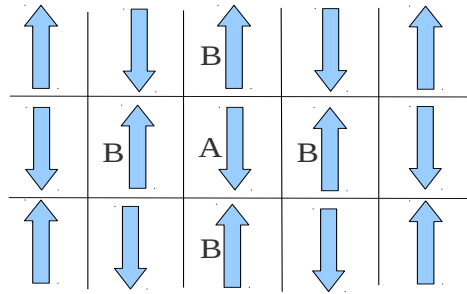
Susceptibilnost antiferomagneta pod Néelovo temperaturo

Jure Zmrzlikar

1 Antiferomagnet $\rightarrow$ paramagnet

Zanima nas susceptibilnost antiferomagneta (AFM) pod kritično temperaturo - temperaturo faznega prehoda. To temperaturo imenujemo tudi Néelova temperatura. Privzeli bomo naslednje:

- Opravka imamo z **Bipartitno mrežo** (Slika 1). To je takšna mreža, kjer sta dva tipa atomov: A in B. Atom tipa A in samo sosede tipa B in obratno. Vidimo, da ima vsak atom za primer 2D kvadratne mreže natanko 4 sosede.
- velikost spinov posameznih atomov je enaka.



Slika 1: Bipartitna mreža v AFM.

Hamiltonjan našega problema je izotropni Heisenbergov model (IHM):

$$\bar{H} = J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{s}_i \vec{s}_j + g\mu_B \sum_i \vec{s}_i \vec{B}_0 \quad J > 0 \quad (1)$$

Na tem mestu naredimo *Približek povprečnega polja* (MFA - Mean field approximation):

$$\vec{s}_i \vec{s}_j = \langle \vec{s}_i \rangle \vec{s}_j + \langle \vec{s}_j \rangle \vec{s}_i - \langle \vec{s}_i \vec{s}_j \rangle \quad (2)$$

Pri tem zanemarimo člen $\langle \vec{s}_i \vec{s}_j \rangle$, saj je konstanten, in daje svoj prispevek le k energiji, ne pa tudi k magnetizaciji in susceptibilnosti. Dobimo:

$$g\mu_B \sum_i \vec{s}_i \left(\vec{B}_0 + \frac{J}{g\mu_B} \sum_{j.n.s.i} \langle \vec{s}_j \rangle \right) =$$

kjer upoštevamo, da ima vsak A atom natanko Z najbližjih B sosedov in obratno:

$$= g\mu_B \sum_{i \in A} \vec{s}_i \left(\vec{B}_0 + \frac{J}{g\mu_B} Z \langle \vec{s}_B \rangle \right) + g\mu_B \sum_{i \in B} \vec{s}_i \left(\vec{B}_0 + \frac{J}{g\mu_B} Z \langle \vec{s}_A \rangle \right) \quad (3)$$

Sedaj upoštevamo zvezo med magnetizacijo in spinom:

$$\vec{M}_A = g\mu_B \frac{N_A}{V} \langle \vec{s}_A \rangle \quad \text{in} \quad \vec{M}_B = g\mu_B \frac{N_B}{V} \langle \vec{s}_B \rangle \quad (4)$$

Pri tem sta N_A število atomov na mreži A in N_B število atomov na mreži B . Privzamemo, da sta $N_A = N_B = N$ in enačbo 4 vstavimo v enačbo 3. Dobimo:

$$H = g\mu_B \sum_{i \in A} \vec{s}_i \underbrace{\left(\vec{B}_0 + \frac{JZV}{g^2\mu_B^2 N} \vec{M}_B \right)}_{B_A} + g\mu_B \sum_{i \in B} \vec{s}_i \underbrace{\left(\vec{B}_0 + \frac{JZV}{g^2\mu_B^2 N} \vec{M}_A \right)}_{B_B} \quad (5)$$

Naš rezultat je model paramagneta! Spinski prispevek smo "pospravili" v t.i. efektivno polje B_A in B_B . Dobra stran vsega tega je, da v takšnem modelu rešitev za magnetizacijo že poznamo:

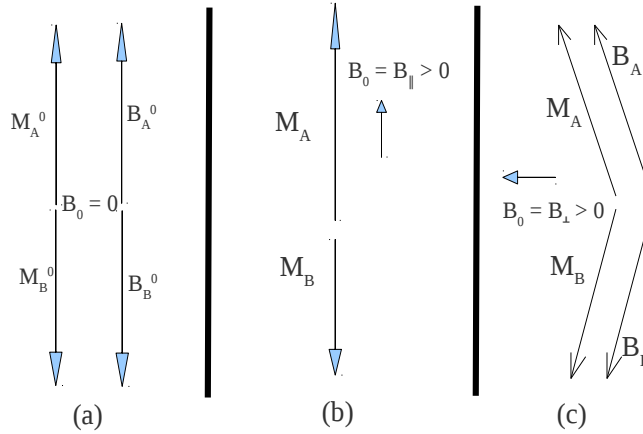
$$\vec{M}_A = \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B |\vec{B}_A| \right) \frac{\vec{B}_A}{|\vec{B}_A|} \quad \vec{M}_B \text{ analogno} \quad (6)$$

Pri tem je $\vec{M}_A$ magnetizacija na podmreži A , B_j j-ta Brillouin-ova funkcija, $\beta = 1/k_B T$ in $\frac{\vec{B}_A}{|\vec{B}_A|}$ enotski vektor v smeri $\vec{B}_A$.

Naš cilj je izračunati susceptibilnost, torej nas zanima, kakšna bo magnetizacija v zunanjem magnetnem polju. Pogledali bomo, kako majhno zunanje magnetno polje spremeni spontano magnetizacijo v AFM. Spontana magnetizacija pa obstaja - to je vendar antiferomagnet.

1.1 Rešitev pri spontani magnetizaciji ($\vec{B}_0 = 0$)

Iz teorije vemo, da je pod Nèelovo temperaturo tudi pri $\vec{B}_0 = 0$ magnetizacija neničelna. Na makroskopski skali to sicer ni res, saj sta $\vec{M}_A$ in $\vec{M}_B$ nasprotno enaki. Efektivno polje $\vec{B}_A$, ki nastopa v izrazu za magnetizacijo v tem primeru kaže prav tako v smeri $\vec{M}_A$.



Slika 2: Magnetizacija pri (a) odsotnem zunanjem polju, (b) polju, vzporednem z osjo z in (c) polju pravokotno glede na os z.

1.2 Susceptibilnost

Susceptibilnost je enaka:

$$\chi = \mu_0 \left. \frac{\partial \vec{M}}{\partial B_0} \right|_{B_0 \rightarrow 0} \quad (7)$$

Susceptibilnost je v resnici tenzor: sprememba magnetizacije bo odvisna tudi od smeri zunanega polja, ne le od njegove velikosti. V našem primeru imamo dve neodvisni možnosti: zunanje polje lahko postavimo vzporedno s spontano magnetizacijo, lahko pa pravokotno nanjo. Katerokoli smer lahko nato sestavimo s superpozicijo. Vse to je narisano tudi na sliki 2.

1.3 Zunanje polje, vzporedno z spontano magnetizacijo: $\vec{B}_{0\parallel}$

Jasno je, da bo magnetizacija še vedno kazala le v z smer. V ta namen lahko količine zapišemo kot skalarje in ne kot vektorje. Zaradi majhnega polja, bodo popravki majhni: spremembo magnetizacij $\vec{M}_A$ in $\vec{M}_B$ zapišemo tako:

$$M_A = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j B_A) = M_A^0 + \Delta M_A \quad (8)$$

$$M_B = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j B_B) = M_B^0 + \Delta M_B \quad (9)$$

Pri tem smo zapisali B_B kot $-B_B$, saj je B_B sam po sebi negativna količina, potrebujemo pa njegovo absolutno vrednost, zato predenj postavimo minus. Ker v izrazih za efektivno polje B_A in B_B nastopa tudi magnetizacija, ta pa se spremeni, se spremenita tudi efektivni polji. Ker gre za majhne spremembe lahko zapišemo:

$$B_A = B_A^0 + \Delta B_A \quad (10)$$

$$B_B = B_B^0 + \Delta B_B \quad (11)$$

To malo spremembo efektivnega polja v (10) in (11) sedaj vstavimo v (8) in (9) ter razvijemo po Taylorju do prvega reda:

$$M_A = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j \left(\beta g \mu_B j (B_A^0 + \Delta B_A) \right) = \frac{N}{V} g \mu_B j \left(B_j (\beta g \mu_B j B_A^0) + \beta g \mu_B j B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) \Delta B_A \right) \quad (12)$$

Vidimo, da je prvi člen na desni prisoten tudi pri $B_0 = 0$, zato ga z vso pravico enačimo z M_A^0 . Drugo člen na desni ni torej nič drugega kot ΔM_A :

$$\Delta M_A = \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) \Delta B_A \quad (13)$$

$$\Delta M_B = \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' \left(\beta g \mu_B j (-B_B^0) \right) \Delta B_B \quad (14)$$

Spomnimo se definicije efektivnega polja B_A in B_B iz enačbe (5). Tudi efektivno polje lahko zapišemo kot vrednost pri $B_0 = 0$ + majhne popravke ΔB_A :

$$B_A = B_A^0 + \Delta B_A = B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} M_B = B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} (M_B^0 + \Delta M_B) \quad (15)$$

Vidimo, da je sta B_A^0 in ΔB_A takšna:

$$B_A^0 = \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} M_B^0 \quad \Delta B_A = B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \Delta M_B \quad (16)$$

Analogno lahko ugotovimo za ΔM_B . . . Drugi člen v zadnji enačbi in njegovo analogijo za ΔB_B sedaj vstavimo v enačbi 13 in 14:

$$\Delta M_A = \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) \left(B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \Delta M_B \right) =$$

$$\Delta M_A = \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) B_0 - JZ j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) \Delta M_B \quad (17)$$

$$\Delta M_B = \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j (-B_B^0) \right) B_0 - JZ j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j (-B_B^0) \right) \Delta M_A \quad (18)$$

Zgornji enačbi seštejemo, ter upoštevamo da je $M = M_A^0 + M_B^0 + \Delta M_A + \Delta M_B$. V AFM velja $M_A^0 = -M_B^0$, zato je skupna magnetizacija M enaka kar $\Delta M_A + \Delta M_B$:

$$M = 2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) B_0 - JZ j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) M \quad (19)$$

Odkoder izrazimo magnetizacijo:

$$M = \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right) B_0}{1 + JZ j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right)} \quad (20)$$

Upoštevamo izraz za susceptibilnost (7) in ugotovimo, da je le ta enaka:

$$\chi_{\parallel} = \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right)}{1 + JZ j^2 \beta B'_j \left(\beta g \mu_B j B_A^0 \right)} \quad (21)$$

Izraz za $\chi_{\parallel}$ velja tudi nad kritično temperaturo.

1.4 Susceptibilnost nad kritično temperaturo T_c

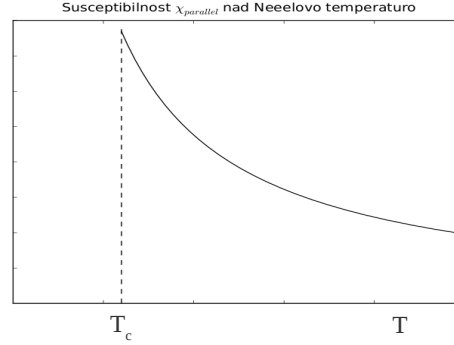
Nad kritično temperaturo spontana magnetizacija izgine. Susceptibilnost pa je definirana pri zunanjem polju 0. Iz tega dvojega je očitno, da bo $B_A = B_A^0 = 0$. Magnetizacija pri odsotnem zunanjem polju nad T_N je seveda enaka 0, saj ima Brillouinova funkcija pri argumentu 0 vrednost 0. Njen odvod pa morda ne! Zapišimo torej razvoj Brillouinove funkcije okoli 0:

$$B_j(x) = \frac{j+1}{3j} x \quad \rightarrow \quad B'_j(x) = \frac{j+1}{3j} \quad (22)$$

Za susceptibilnost nad T_c dobimo:

$$\chi_{\parallel} = \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 \beta j \frac{j+1}{3} T}{1 + JZ j \beta \frac{j+1}{3} T} = \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 \frac{1}{k_B} j \frac{j+1}{3}}{T + JZ j \frac{1}{k_B} \frac{j+1}{3}} = \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 \frac{1}{k_B} j \frac{j+1}{3}}{T + T_N} \quad (23)$$

Kjer smo definirali Néelovo temperaturo $T_N = JZ j \frac{1}{k_B} \frac{j+1}{3}$. Susceptibilnost nad T_N torej izgleda takole:



Slika 3: Susceptibilnost nad Neelovo temperaturo. Pod njo susceptibilnosti ne poznamo, zato je tam nismo risali.

1.5 Susceptibilnost tik pod kritično temperaturo T_N in spin $1/2$

Od sedaj naprej bomo vse delali kot da imamo opravka z delci z velikostjo spina $j = 1/2$. Prepišemo lahko tudi Néelovo temperaturo: kot $T_N = JZ \frac{1}{4k_B}$. Brillouinove funkcije pa se za vrednost $j = 1/2$ zapišejo kot:

$$B_{1/2}(x) = \tanh(x) \quad B'_{1/2}(x) = 1 - B_{1/2}^2(x) = 1 - \tanh^2(x) \quad (24)$$

Brillouinova funkcija nam podaja spontano magnetizacijo. Vemo, da monotonno narašča od 0 do vrednosti 1, ki jo doseže v neskončnosti. Iz enačbe (6) vidimo, da je predfaktor Brillouinove funkcije kar maksimalna magnetizacija. To je hkrati tudi vrednost magnetizacije pri temperaturi $T=0$. Zapišemo lahko torej:

$$B_j(x) = \frac{M_A}{M_A(T=0)} \quad \rightarrow \quad B'_{1/2} = 1 - \left(\frac{M_A}{M_A(T=0)} \right)^2 \quad (25)$$

in vstavimo to v enačbo (21)

$$\chi_{\parallel} = \frac{2^N g^2 \mu_B^2 \frac{1}{4} \beta B'_j \left(1 - \left(\frac{M_A}{M_A(T=0)} \right)^2 \right) T}{1 + JZ \frac{1}{4} \beta \left(1 - \left(\frac{M_A}{M_A(T=0)} \right)^2 \right) T} = \frac{2^N g^2 \mu_B^2 \frac{1}{4k_B} B'_j \left(1 - \left(\frac{M_A}{M_A(T=0)} \right)^2 \right) T}{T + T_N \left(1 - \left(\frac{M_A}{M_A(T=0)} \right)^2 \right) T} \quad (26)$$

Vemo že, da je nad temperaturo prehoda spontana magnetizacija enaka nič. Če pa smo pod kritično temperaturo, pa moramo pogledati kako se obnaša magnetizacija. Le tako bomo lahko izračunali susceptibilnost pod T_N . Tega ne bomo naredili v splošnem. V prejšnji nalogi smo pokazali, da magnetizacija okoli kritične temperature raste korensko (v feromagnetu). Podobno bi lahko naredili za AFM, a bi trajalo dodatno uro...

Pogledali si bomo le rezultat za spontano magnetizacijo M_A^0 pri nizkih temperaturah. Le to lahko izračunamo iz enačbe (12). Zapišimo je še enkrat in upoštevajmo da je $j = 1/2$:

$$M_A^0 = \frac{N}{2V} g \mu_B \tanh \left(\beta g \frac{1}{2} \mu_B B_A^0 \right) \quad \text{in} \quad B_A^0 = \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} M_B^0 \quad \rightarrow \quad M_A^0 = \frac{N}{2V} g \mu_B \tanh \left(\beta g \frac{1}{2} \mu_B \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} (-M_B^0) \right) \quad (27)$$

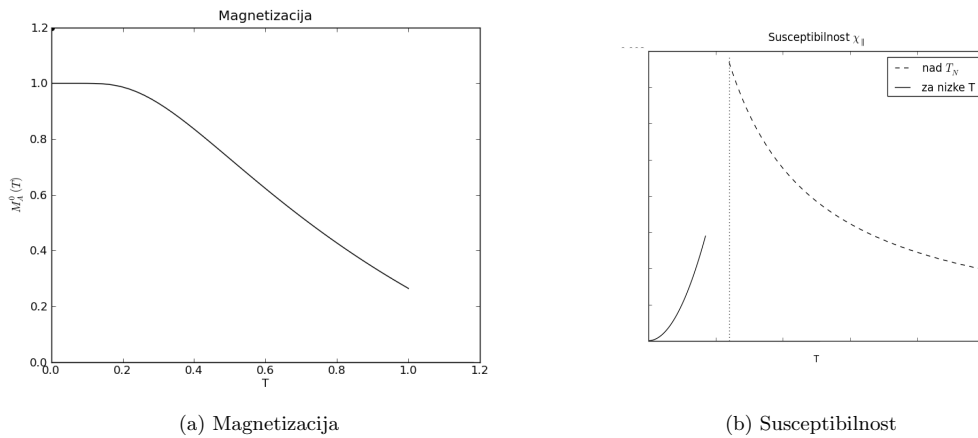
Tukaj uporabimo razvoj funkcije $\tanh(x) = 1 - 2e^{-2x}$, ko gre $x \rightarrow \infty$. Upoštevamo tudi da je $\frac{N}{2V} g \mu_B = M_A^0(T=0)$ in da je $M_A^0 = -M_B^0$. Dobimo:

$$M_A^0 = M_A^0(T=0) \left(1 - 2 \exp \left(-\beta \frac{JZV}{g\mu_B N} M_A^0 \right) \right) \quad (28)$$

Naredili bomo še en približek: privzeli bomo, da je M_A^0 v eksponentnem členu kar enak $M_A^0(T=0) = \frac{N}{V} g\mu_B j$. Dobimo:

$$M_A^0 = M_A^0(T=0) \left(1 - 2 \exp \left(-\beta \frac{JZ}{2} \right) \right) \quad (29)$$

Narišimo ta rezultat:



Slika 4: Magnetizacija in susceptibilnost. Slednjo izračunamo "na okož argumentom, da je magnetizacija konstantna.

Vidimo, da je odvod magnetizacije pri $T = 0$ enak 0. Torej je susceptibilnost pri $T=0$ zares enaka 0!

Sedaj smo izračunali susceptibilnost za zelo majhne temperature, prej pa za temperature nad faznim prehodom (nad T_N).

1.6 Zunanje polje pravokotno na spontano magnetizacijo: $\vec{B}_\perp$

Da bi lahko opisali vpliv kakršnegakoli polja na magnetizacijo in tako tudi na susceptibilnost moramo pogledati tudi kaj povzroči polje, pravokotno na spontano magnetizacijo. Efektivno polje polje je tudi sedaj oblike:

$$\vec{B}_A = \vec{B}_0 - \frac{JZV}{Ng^2\mu_B^2} \vec{M}_B \quad (30)$$

le vektorji so nekoliko drugače obrnjeni ... Slika 2. Izraza za $\vec{M}_A$ in $\vec{M}_B$ od prej seštejemo:

$$\vec{M} = \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B j |\vec{B}_A| \right) \left(\frac{\vec{B}_A}{|\vec{B}_A|} + \frac{\vec{B}_B}{|\vec{B}_B|} \right) \quad (31)$$

Poglejmo koliko je vrednost v zadnjem oklepaju. Pomagajmo si s skico (Slika 2). Vidimo, da se zunanje polje sešteje, dobimo pa tudi prispevek magnetizacije:

$$\frac{\vec{B}_A}{|\vec{B}_A|} + \frac{\vec{B}_B}{|\vec{B}_B|} = \frac{\vec{B}_A + \vec{B}_B}{|\vec{B}_A|} = \left(2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{g^2\mu_B^2 N} \vec{M} \right) \frac{1}{|\vec{B}_A|} \quad (32)$$

Spomnimo se definicije susceptibilnosti v (7). Vidimo, da z izračun potrebujemo le linearen prispevek magnetnega polja k magnetizaciji. Vse ostalo bo namreč k χ prispevalo nič! Zato lahko naredimo približek: v argumentu Brillouinove funkcije namesto $|B_A|$ vstavimo $|B_A^0|$. Če bi računali točno bi dobili popravke višjih redov, ki pa bi z zahtevo da se susceptibilnost računa pri $B_0 = 0$ postali nični. Magnetizacija je v približku torej enaka:

$$\vec{M} = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j |\vec{B}_A^0|) \left(2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \vec{M} \right) \frac{1}{|B_A^0|} \quad (33)$$

Spomnimo se, da je:

$$B_A^0 = \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} M_B^0 = \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j B_A^0) = \frac{JZ}{g \mu_B} j B_j (\beta g \mu_B j B_A^0) = |B_A^0| \quad (34)$$

Vstavimo enačbo (34) v imenoalec enačbe (33) in dobimo:

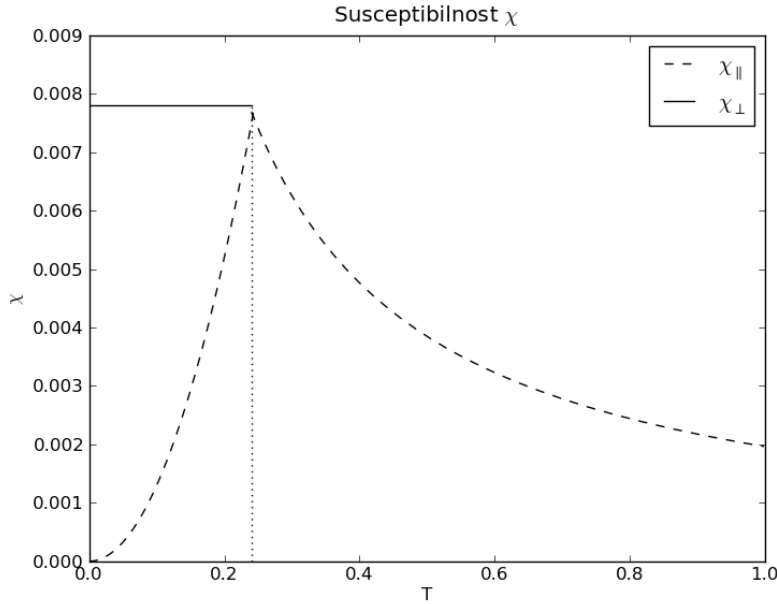
$$\vec{M} = \frac{N}{JZV} g^2 \mu_B^2 \left(2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \vec{M} \right) = \frac{2N}{JZV} g^2 \mu_B^2 B_0 - M \quad (35)$$

$$\rightarrow \vec{M} = \frac{N}{JZV} g^2 \mu_B^2 B_0 \quad (36)$$

in iz tega susceptibilnost $\chi_{\perp}$:

$$\chi_{\perp} = \frac{N}{JZV} g^2 \mu_B^2 \quad (37)$$

Vidimo, da je $\chi_{\perp}$ konstantna in enaka max. vrednosti $\chi_{\parallel}$. To lahko vidimo tudi na sliki 5.



Slika 5: Obe susceptibilnosti; $\chi_{\perp}$ in $\chi_{\parallel}$.

FIZIKA KONDENZIRANE SNOVI

Specifična toplota magnonov v feromagnetu

Maruša Vitek

17. 4. 2012

Naloga

Izračunaj specifično toplotu magnonov v tridimenzionalnem feromagnetu pri nizki temperaturi ($k_B T \ll J$). Uporabi približno zvezo za disperzijo magnonov $\varepsilon = Ak^2$.

Rešitev

Najprej bomo na kratko preleteli izpeljavo disperzijske relacije za magnone, ki smo jo naredili že na predavanjih. Zapišemo hamiltonian za feromagnet in ga razpišemo z operatorji S^+ , S^- in S^z

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[\frac{1}{2}(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+) + S_i^z S_j^z \right], \quad (1)$$

kjer je $\mathbf{S}_i$ operator spina i -tega delca in J pozitivna konstanta, seštevamo pa po vseh parih najbližjih sosedov i in j . Osnovno stanje feromagneta $|\psi_0\rangle$ je stanje, kjer so vsi spini obrnjeni v isto smer. Pričakujemo, da bo prvo vzbujeno stanje feromagneta tako, kjer bo eden od spinov obrnjen drugače kot ostali. To stanje lahko zapišemo z operatorjem S^- :

$$|\varphi_i\rangle = S_i^- |\psi_0\rangle \quad (2)$$

Ko na to stanje delujemo s hamiltonianom, ugotovimo, da $|\varphi_i\rangle$ ni lastno stanje hamiltoniana.



Slika 1: Na shemi a) je prikazano osnovno stanje feromagneta $|\psi_0\rangle$, na shemi b) pa stanje $|\varphi_i\rangle$, kjer je i -ti spin obrnjen drugače kot ostali.

$$H|\varphi_i\rangle = \left(E_0 + \frac{JZ}{2}\right)|\varphi_i\rangle - \frac{J}{2} \sum_{j \text{ n.s. } i} |\varphi_j\rangle \quad (3)$$

Za vzbujeno stanje, ki je lastno stanje hamiltoniana, vzamemo nastavek v obliki magnona

$$|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_j e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j} |\varphi_j\rangle, \quad (4)$$

kjer je N število vseh spinov v sistemu, $\mathbf{R}_j$ pa radij-vektor do j -tega spina. To stanje je linearna kombinacija vseh stanj z enim obrnjenim spinom. Stanje $|\phi_{\mathbf{k}}\rangle$ je lastna funkcija hamiltoniana z lastno energijo $E_0 + \varepsilon_{\mathbf{k}}$, kjer je E_0 lastna energija osnovnega stanja in

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = J \sum_{j \text{ n.s. } 0} \sin^2 \left(\frac{\mathbf{k} \cdot \mathbf{R}_j}{2} \right) \xrightarrow{k_B T \ll J} \sim A k^2. \quad (5)$$

Za nizke temperature lahko sinus razvijemo in dobimo približno kvadratno disperzijo, ki jo bomo uporabili pri izračunu specifične toplote.

Specifično toploto magnonov v feromagnetu bomo izračunali kot odvod energije po temperaturi. Zato najprej izpeljimo izraz za energijo. Pri dovolj majhni gostoti magnonov se ti obnašajo kot bozoni. Njihovo zasedbeno število je zato

$$n_{\mathbf{k}} = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_{\mathbf{k}}} - 1}, \quad (6)$$

energijo pa izračunamo kot vsoto, ki jo lahko prevedemo na integral:

$$E = \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}} \varepsilon_{\mathbf{k}} \rightarrow \int_0^{\infty} \frac{\varepsilon}{e^{\beta \varepsilon} - 1} g(\varepsilon) d\varepsilon. \quad (7)$$

Izračunamo gostoto stanj $g(\varepsilon)$ in pri tem upoštevamo, da je diferencial energije $d\varepsilon = 2Ak dk$ in da je za tridimenzionalni primer $\frac{dN}{dk} = 4\pi k^2 \frac{V}{(2\pi)^3}$:

$$g(\varepsilon) = \frac{1}{V} \frac{dN}{d\varepsilon} = \frac{1}{V} \frac{dN}{dk} \frac{dk}{d\varepsilon} = \frac{1}{2AVk} \frac{dN}{dk} = \frac{k}{4\pi^2 A} = \frac{\sqrt{\varepsilon}}{4\pi^2 A^{3/2}}. \quad (8)$$

Ta izraz nesemo v integral in dobimo:

$$E = \int_0^{\infty} \frac{1}{4\pi^2 A^{3/2}} \frac{\varepsilon^{3/2}}{e^{\beta \varepsilon} - 1} d\varepsilon = \frac{1}{4\pi^2 A^{3/2} \beta^{5/2}} \int_0^{\infty} \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} dx \quad (9)$$

Na tem mestu upoštevamo, da je izraz pod integralom enak $\frac{3}{4}\sqrt{\pi}\zeta\left(\frac{5}{2}\right) = 1.783 = I$ in dobimo končni izraz za energijo

$$E = \frac{I(k_B T)^{5/2}}{4\pi^2 A^{3/2}}. \quad (10)$$

Ta izraz zdaj odvajamo po temperaturi in dobimo prispevek magnonov k specifični toploti feromagneta:

$$c = \frac{\partial E}{\partial T} = \frac{5Ik_B}{8\pi^2} \left(\frac{k_B T}{A} \right)^{3/2}. \quad (11)$$

V primeru tridimenzionalnega feromagneta je specifična toplota sorazmerna s $T^{3/2}$. V dveh dimezijah je gostota stanj konstantna, zato je c sorazmerna s temperaturo. V eni dimenziji pa je gostota stanj sorazmerna z $\varepsilon^{-1/2}$ in je zato specifična toplota sorazmerna s $\sqrt{T}$.

FIZIKA KONDENZIRANE SNOVI

Magnoni v antiferomagnetu

Maruša Vitek

17. 4. 2012

Naloga

Izpelji disperzijsko zvezo za magnone v enodimenzionalnem antiferomagnetu.

Rešitev

Antiferomagnet obravnavamo v Heisenbergovem modelu, zato hamiltonian zapišemo kot

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1)$$

kjer je J pozitivna konstanta, $\mathbf{S}_i$ pa i -ti spin. Obravnavo bomo začeli v Heisenbergovi sliki kvantne mehanike. Časovno odvisnost funkcij v Schrödingerjevi sliki, $|\psi(t)\rangle = e^{-i\frac{H}{\hbar}t}|\psi(0)\rangle$, tu nadomesti časovna odvisnost operatorjev:

$$\langle \psi(t) | A | \psi(t) \rangle = \langle \psi(0) | e^{i\frac{H}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H}{\hbar}t} | \psi(0) \rangle \xrightarrow[\text{sliki}]{\text{v Heisenbergovi}} \langle \psi(0) | e^{i\frac{H}{\hbar}t} A e^{-i\frac{H}{\hbar}t} | \psi(0) \rangle = \langle \psi | A(t) | \psi \rangle. \quad (2)$$

Z odvajanjem operatorja $A(t)$ po času dobimo Von Neumannovo enačbo

$$\frac{dA}{dt} = \frac{i}{\hbar} H A(t) - \frac{i}{\hbar} A(t) H = \frac{i}{\hbar} [H, A(t)] \implies i\hbar \dot{A} = [A(t), H]. \quad (3)$$

Za izbrani p -ti spin zapišemo gibalno enačbo:

$$i\hbar \dot{\mathbf{S}}_p = [\mathbf{S}_p, J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j]. \quad (4)$$

Uporabimo zvezo za komutator komponent spina in splošno komutatorsko zvezo.

$$\begin{aligned} [S_{i\alpha}, S_{j\beta}] &= i\hbar \delta_{ij} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{i\gamma} \\ [A, BC] &= B[A, C] + [A, B]C \end{aligned} \quad (5)$$

Za koordinato α ($\alpha, \beta \in \{x, y, z\}$) se enačba (4) prepiše v

$$\begin{aligned}
 i\hbar\dot{S}_{p\alpha} &= J[S_{p\alpha}, \sum_{\langle i,j \rangle, \beta} S_{i\beta} \cdot S_{j\beta}] = J \sum_{\langle i,j \rangle, \beta} \left([S_{p\alpha}, S_{i\beta}] S_{j\beta} + S_{i\beta} [S_{p\alpha}, S_{j\beta}] \right) = \\
 &= i\hbar J \sum_{\langle i,j \rangle, \beta, \gamma} \left(\delta_{pi} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{p\gamma} S_{j\beta} + S_{i\beta} \delta_{pj} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{p\gamma} \right) = \\
 &= i\hbar \frac{J}{2} \left(\sum_{jn.s.p,\beta,\gamma} \delta_{pi} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{p\gamma} S_{j\beta} + \sum_{jn.s.p,\beta} S_{i\beta} \delta_{pj} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{p\gamma} \right) \Big|_{\text{preindeksiramo in seštejemo}} \\
 &= i\hbar J \sum_{jn.s.p,\beta,\gamma} \varepsilon_{\alpha\beta\gamma} S_{j\beta} S_{p\gamma} = i\hbar J \sum_{jn.s.p} [\mathbf{S}_i \times \mathbf{S}_j]_{\alpha}
 \end{aligned} \tag{6}$$

Spine bomo zdaj obravnavali kot vektorje, klasično, ne da bi se preveč obremenjevali z dejstvom, da je spin sicer povsem kvantna količina. Izkaže se, da s tem postopkom dobimo enak rezultat kot s kvantnomehanskim.

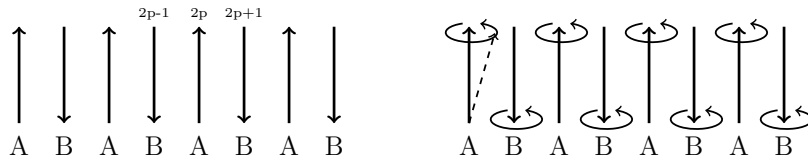
Do sedaj nas geometrija problema ni zanimala, zdaj pa si delo poenostavimo in se spomnimo, da imamo opravka z enodimenzionalnim antiferomagnetom. Upoštevamo da sta v vsoti po najbližjih sosedih p -tega spina le dva člena in zapišemo poenostavljeno gibalno enačbo:

$$\dot{\mathbf{S}}_p = J(\mathbf{S}_{p-1} \times \mathbf{S}_p + \mathbf{S}_{p+1} \times \mathbf{S}_p) \tag{7}$$

Razpišemo jo po komponentah:

$$\begin{aligned}
 \dot{S}_p^x &= J(S_{p-1}^y S_p^z - S_{p-1}^z S_p^y + S_{p+1}^y S_p^z - S_{p+1}^z S_p^y) \\
 \dot{S}_p^y &= J(S_{p-1}^z S_p^x - S_{p-1}^x S_p^z + S_{p+1}^z S_p^x - S_{p+1}^x S_p^z) \\
 \dot{S}_p^z &= J(S_{p-1}^x S_p^y - S_{p-1}^y S_p^x + S_{p+1}^x S_p^y - S_{p+1}^y S_p^x)
 \end{aligned} \tag{8}$$

Magnoni so majhna nihanja spinov okrog ravnovesne lege.



Slika 1: Na shemi a) je prikazano ravnovesno (osnovno) stanje antiferomagneta, na shemi b) pa vzbujeno stanje, magnon, kjer spini nihajo okrog ravnovesne lege. Prikazana je tudi razdelitev na podmreži A in B.

Ravnovesna lega spinov je $(0, 0, \pm S^z)$. Upoštevajmo, da so odkloni majhni: $S^x, S^y \ll S$ in $S^z \simeq \pm S$. Produkte $S^x S^y$ lahko zanemarimo enačba za z -komponento se poenostavi v $\dot{S}_p^z = 0$. Antiferomagnet zdaj razdelimo na dve podmreži:

A: vsebuje spine s sodimi indeksi ($2p$), ki so obrnjeni navzgor ($S^z = S$).

B: vsebuje spine z lihimi indeksi ($2p+1$), ki so obrnjeni navzdol ($S^z = -S$).

Enačbi za komponenti x in y prepišemo za vsako podmrežo posebej in pri tem za S^z že vstavimo $\pm S$.

$$\begin{aligned} \text{A: } \dot{S}_{2p}^x &= JS(2S_{2p}^y + S_{2p+1}^y + S_{2p-1}^y) \\ \dot{S}_{2p}^y &= -JS(2S_{2p}^x + S_{2p+1}^x + S_{2p-1}^x) \\ \text{B: } \dot{S}_{2p+1}^x &= -JS(2S_{2p+1}^y + S_{2p}^y + S_{2p+2}^y) \\ \dot{S}_{2p+1}^y &= JS(2S_{2p+1}^x + S_{2p}^x + S_{2p+2}^x) \end{aligned} \quad (9)$$

Enačbi za posamezno podmrežo seštejemo in uvedemo kompleksno spremenljivko $S^+ = S^x + iS^y$.

$$\begin{aligned} \text{A: } i\dot{S}_{2p}^+ &= JS(2S_{2p}^+ + S_{2p+1}^+ + S_{2p-1}^+) \\ \text{B: } -i\dot{S}_{2p+1}^+ &= JS(2S_{2p+1}^+ + S_{2p}^+ + S_{2p+2}^+) \end{aligned} \quad (10)$$

Sistem bomo rešili z nastavkom za ravne valove:

$$\begin{aligned} S_{2p}^+ &= Ae^{i(2pka - \omega t)} \\ S_{2p+1}^+ &= Be^{i((2p+1)ka - \omega t)} \end{aligned} \quad (11)$$

Nastavek vstavimo v enačbi, krajšamo $e^{i(2pka - \omega t)}$ v enačbi za podmrežo A in $e^{i((2p+1)ka - \omega t)}$ v enačbi za podmrežo B in dobimo sistem:

$$\begin{aligned} \text{A: } \omega A &= 2JS(A + B \cos(ka)) \\ \text{B: } \omega B &= -2JS(B + A \cos(ka)) \end{aligned} \quad (12)$$

Definiramo $2JS \equiv \omega_0$. Da je sistem rešljiv, mora biti determinanta enaka 0:

$$\begin{vmatrix} \omega - \omega_0 & -\omega_0 \cos(ka) \\ \omega_0 \cos(ka) & \omega + \omega_0 \end{vmatrix} = \omega^2 - \omega_0^2 + (\omega_0 \cos(ka))^2 = 0 \quad (13)$$

Od tu sledi izraz za disperzijo v enodimenzionalnem antiferomagnetu:

$$\omega^2 = \omega_0^2 \sin^2(ka) \implies \boxed{\omega = \omega_0 |\sin(ka)|} \quad (14)$$

Del VI

Dielektrične lastnosti izolatorjev

Polarizabilnost vodikovega atoma

Fizika kondenzirane snovi

Jaka Mur, 24.2.2012

Naloga

Izračunaj polarizabilnost vodikovega atoma.

Reševanje

Hamiltonian vodikovega atoma v zunanjem električnem polju $\vec{E} = |\vec{E}|\vec{e}_z$ zapišemo za elektron, ki čuti vpliv pozitivnega protona v jedru. S tem prevedemo problem dveh teles na problem enega:

$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}\nabla^2 - \frac{e_0^2}{4\pi\epsilon_0 r} - e_0|\vec{E}|z \equiv H_0 + H'.$$

V Hamiltonianu H je $H' = -e_0|\vec{E}|z$ popravek k Hamiltonianu prostega vodikovega atoma H_0 , naboj elektrona je $e_0 = 1,6 \cdot 10^{-19}$ As. Osnovno stanje vodikovega atoma opiše funkcija

$$\psi_0(r) = \frac{2}{r_B^{3/2}} \frac{1}{\sqrt{4\pi}} e^{-r/r_B},$$

za katero velja $H\psi_0 = E_0\psi_0$, kjer je $E_0 = -13,6\text{eV}$.

Reševanja problema se lotimo z variacijskim pristopom, iščemo minimum energije

$$E = \frac{\langle\psi|H|\psi\rangle}{\langle\psi|\psi\rangle} = \min.$$

Nastavek, ki ga uporabimo, je linearni popravek funkcije osnovnega stanja vodikovega atoma

$$\psi = \psi_0(1 + \lambda z) \equiv \psi_0 + \psi'.$$

Funkcija ni normirana, zato moramo najprej izračunati

$$\langle\psi|\psi\rangle = \int \psi^*(\vec{r})\psi(\vec{r})d\vec{r} = \int \psi_0^2(\vec{r})(1 + 2\lambda z + \lambda^2 z^2)d\vec{r} = 1 + \lambda^2 \int \psi_0^2(\vec{r})z^2d\vec{r} = 1 + \lambda^2 r_B^2.$$

Ostane nam še pričakovana prednost Hamiltoniana

$$\begin{aligned}\langle\psi|H|\psi\rangle &= \langle\psi_0 + \psi'|H_0 + H'|\psi_0 + \psi'\rangle = \\ &= \langle\psi_0|H_0|\psi_0\rangle + \langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle + \langle\psi_0|H_0|\psi'\rangle + \langle\psi_0|H'|\psi'\rangle + \langle\psi'|H_0|\psi_0\rangle + \langle\psi'|H'|\psi_0\rangle \\ &\quad + \langle\psi'|H_0|\psi'\rangle + \langle\psi'|H'|\psi'\rangle\end{aligned}$$

Računanju nekaterih členov se lahko izognemo z upoštevanjem parnosti funkcij. Operator parnosti P nam da $P\psi_0 = +1$, $P\psi' = -1$, $PH_0 = +1$ in $PH' = -1$. Če je skupna parnost izraza $P\langle A|B|C\rangle = PA * PB * PC = -1$, potem je $\langle A|B|C\rangle = 0$. Iz tega sledi, da so izrazi

$$\langle\psi_0|H'|\psi_0\rangle = \langle\psi_0|H_0|\psi'\rangle = \langle\psi'|H_0|\psi_0\rangle = \langle\psi'|H'|\psi'\rangle = 0.$$

Po definiciji osnovnega stanja je $\langle \psi_0 | H_0 | \psi_0 \rangle = E_0$. Ker sta $\psi_0, \psi' \in \mathbb{R}$, ostanejo trije členi

$$\langle \psi | H | \psi \rangle = E_0 + 2\langle \psi' | H' | \psi_0 \rangle + \langle \psi' | H_0 | \psi' \rangle.$$

Preprosteje je izračunati $\langle \psi' | H' | \psi_0 \rangle$, ki je

$$\langle \psi' | H' | \psi_0 \rangle = \int \psi_0(\vec{r}) \lambda z * (-e_0 |\vec{E}| z) * \psi_0(\vec{r}) d\vec{r} = -e_0 \lambda |\vec{E}| \int \psi_0^2(\vec{r}) z^2 d\vec{r} = -e_0 \lambda |\vec{E}| r_B^2.$$

Za izračun $\langle \psi' | H_0 | \psi' \rangle$ pogledimo najprej, kaj naredi $H_0 \psi'$.

$$\nabla^2 = \frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \rightarrow \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} + \frac{\partial^2}{\partial z^2} \right) (\psi_0 \lambda z) = \lambda z \left(\frac{\partial^2}{\partial x^2} + \frac{\partial^2}{\partial y^2} \right) \psi_0 + 2\lambda \frac{\partial \psi_0}{\partial z} + \lambda z \frac{\partial^2 \psi_0}{\partial z^2},$$

iz česar sledi, da je

$$H_0 \psi' = \lambda z H_0 \psi_0 - \frac{\hbar^2}{2m} 2\lambda \frac{\partial \psi_0}{\partial z} = \lambda z - \frac{\hbar^2}{2m} 2\lambda \frac{\partial \psi_0}{\partial z}.$$

Sedaj lahko izračunamo cel integral in upoštevamo, da je $E_0 = -\frac{\hbar^2}{2mr_B^2}$:

$$\begin{aligned} \langle \psi' | H_0 | \psi' \rangle &= \int \lambda z \psi_0 \left(E_0 \lambda z - \frac{\hbar^2}{2m} 2\lambda \frac{\partial \psi_0}{\partial z} \right) d\vec{r} = \lambda^2 E_0 \int \psi_0^2(\vec{r}) z^2 d\vec{r} - \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 \int z \frac{\partial(\psi_0^2(\vec{r}))}{\partial z} d\vec{r} \\ &= \lambda^2 E_0 r_B^2 - \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 \int \frac{\partial}{\partial z} (z \psi_0^2(\vec{r})) d\vec{r} + \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 \int \psi_0^2(\vec{r}) d\vec{r} = \lambda^2 E_0 r_B^2 + \frac{\hbar^2}{2m} \lambda^2 = 0. \end{aligned}$$

Celoten izraz za energije, ki ga želimo minimizirati po λ , je

$$E = \frac{E_0 - 2e_0 \lambda |\vec{E}| r_B^2}{1 + \lambda^2 r_B^2}.$$

Minimum poiščemo z odvodom

$$\frac{\partial E}{\partial \lambda} = 0 \rightarrow \lambda|_{E_{MIN}} = \frac{E_0 \pm \sqrt{E_0^2 + 4e_0^2 |\vec{E}|^2 r_B^2}}{2e |\vec{E}| r_B^2},$$

kar lahko za $E_0 \gg e_0 |\vec{E}| r_B$ in ob upoštevanju pričakovane smeri perturbacije, tako da vzamemo negativno predznačen del, poenostavimo v

$$\lambda \cong -\frac{e_0 |\vec{E}|}{E_0}.$$

Iz perturbirane valovne funkcije izračunamo dipolni moment, ki se po smeri sklada s smerjo zunanjega električnega polja

$$p_z = -e_0 \int \psi^2(\vec{r}) \vec{r} d\vec{r} = -e_0 \int \psi_0^2(\vec{r}) \left(1 - \frac{e |\vec{E}|}{E_0} z \right)^2 z d\vec{r} = -\frac{2e_0^2 |\vec{E}| r_B^2}{E_0} \equiv \alpha |\vec{E}|.$$

Ponovno upoštevamo izraz za energijo osnovnega stanja vodikovega atoma E_0 in dobimo polarizabilnost, ki je

$$\alpha = 16\pi\epsilon_0 r_B^3.$$

Univerza v Ljubljani
Fakulteta za *matematiko in fiziko*



Oddelek za fiziko

naloga pri predmetu Kondenzirana snov – vaje, prvi letnik II. bolonjske stopnje

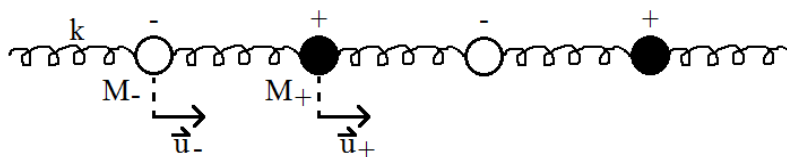
Disperzijska relacija za polaritone

Avtorica: Nina Lopič
Mentor: doc. dr. Tomaž Rejec
Ljubljana, maj 2012

Iščemo disperzijsko relacijo $\omega = \omega(k)$ za izolatorje, točneje za dvoatomni ionski kristal.

Najprej poiščemo odvisnost dielektričnosti od frekvence $\epsilon(\omega)$. To zvezo smo izpeljali na predavanjih pri prof. dr. Petru Prelovšku. Tu jo izpeljemo po [1].

Gledamo 1D model (Slika 1), kjer imajo negativni ioni maso M_- in pozitivni M_+ , koeficient vzmeti je k , u_- je odmik negativnega iona in u_+ je odmik pozitivnega.



Slika 1: 1D model dvoatomnega ionskega kristala.

Po Newtonu velja:

$$M_- \ddot{u}_- = -k(u_- - u_+) - eE_{\text{loc}} \quad (1)$$

in

$$M_+ \ddot{u}_+ = -k(u_+ - u_-) + eE_{\text{loc}}, \quad (2)$$

pri čemer je e naboj, E_{loc} pa lokalno električno polje okoli iona.

Naredimo nekaj substitucij:

$$u_+ - u_- = u,$$

$$\frac{1}{M} = \frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-}, \quad (3)$$

$$\frac{k}{M} = \bar{\omega}^2,$$

$$\mathbf{u} = \mathbf{u}_0 e^{-i\omega t},$$

$$\mathbf{E}_{\text{loc}} = \mathbf{E}_0 e^{-i\omega t}.$$

Od enačbe (2) odštejemo enačbo (1), uporabimo substitucije (3) in dobimo:

$$\mathbf{u}_0 = \frac{e\mathbf{E}_0/M}{\bar{\omega}^2 - \omega^2}, \quad (4)$$

pri čemer je ω frekvenca nihanja.

Ob upoštevanju enačbe (4) je polarizabilnost ionskih nihanj α_n takšna:

$$\alpha_n = \frac{p_0}{E_0} = \frac{eu_0}{E_0} = \frac{e^2}{M(\bar{\omega}^2 - \omega^2)}, \quad (5)$$

pri čemer je p_0 magnetni dipolni moment.

Polarizabilnost pozitivnih, negativnih ionov in polarizabilnost ionskih nihanj je:

$$\alpha(\omega) = \alpha^+ + \alpha^- + \frac{e^2}{M(\bar{\omega}^2 - \omega^2)}. \quad (6)$$

Spomnimo se Clausius-Mossottijeve zveze, ki povezuje dielektričnost ϵ in polarizabilnost:

$$\frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2} = \frac{4\pi\alpha(\omega)}{3V}, \quad (7)$$

pri čemer je V volumen primitivne celice v mirovanju.

Če enačbo (6) vstavimo v (7), dobimo:

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_\infty - \epsilon_0}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2} - 1}, \quad (8)$$

$$\omega_T^2 = \bar{\omega}^2 \left(\frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_0 + 2} \right),$$

$$\epsilon_0 > \epsilon_\infty,$$

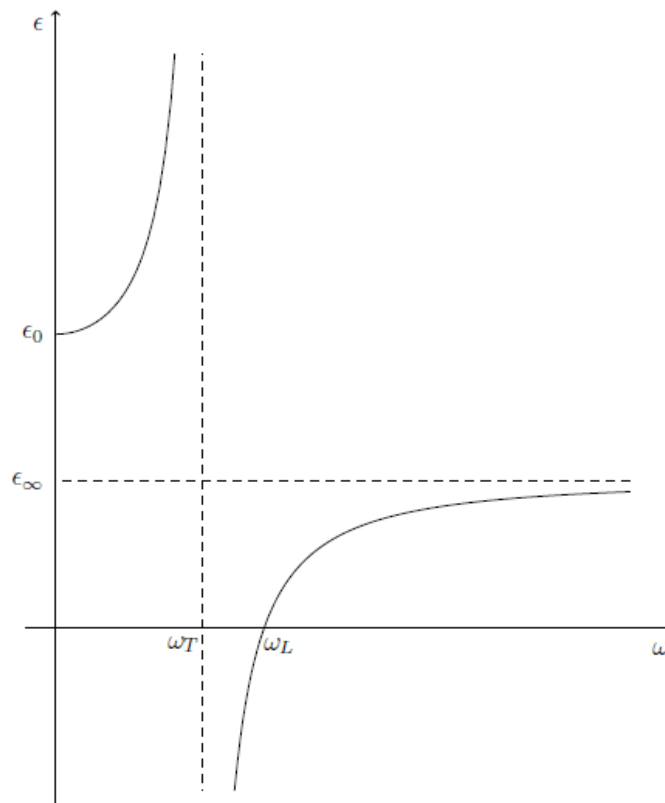
pri čemer je ϵ_0 dielektričnost pri zelo nizkih frekvencah, ϵ_∞ pa pri zelo visokih frekvencah.

Poglejmo limite enačbe (8):

$$\lim_{\omega \rightarrow \infty} \epsilon(\omega) = \epsilon_\infty,$$

$$\lim_{\omega \rightarrow 0} \epsilon(\omega) = \epsilon_0. \quad (9)$$

Pri funkciji $\epsilon(\omega)$ hitro vidimo pol pri ω_T . Za ničlo pa velja $\omega_L^2 = \omega_T^2 \epsilon_0 / \epsilon_\infty$. Funkcijo $\epsilon(\omega)$ še narišemo:



Slika 2: Odvisnost dielektričnosti od frekvence. ω_T in ω_L sta transverzalna in longitudinalna frekvenca.

Zanima nas, kako je dielektričnost ϵ povezana z valovnim vektorjem $\mathbf{k}$. Odvisnost dobimo iz Maxwellovih enačb, pri čemer upoštevamo, da imamo izolator:

$$\begin{aligned}\nabla \cdot \mathbf{E} &= \frac{\rho}{\epsilon_0}, \\ \nabla \cdot \mathbf{B} &= 0, \\ \nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}.\end{aligned}\tag{10}$$

Upoštevamo še:

$$\begin{aligned}\mathbf{B} &= \mu \mu_0 \mathbf{H}, \quad \mu = 1, \\ \mathbf{D} &= \epsilon(\omega) \epsilon_0 \mathbf{E}.\end{aligned}\tag{11}$$

Iz enačb (10) in (11) izpeljemo valovno enačbo (znebimo se magnetnih delov):

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{H} &= \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t} \quad \text{in} \quad \mathbf{B} = \mu \mu_0 \mathbf{H} \\ \Rightarrow \nabla \times \mathbf{B} &= \mu_0 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}.\end{aligned}\tag{12}$$

$$\begin{aligned}\nabla \times \mathbf{E} &= -\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}, \\ \nabla \times (\nabla \times \mathbf{E}) &= \nabla \times \left(-\frac{\partial \mathbf{B}}{\partial t}\right), \\ \nabla(\nabla \cdot \mathbf{E}) - \nabla^2 \mathbf{E} &= -\frac{\partial}{\partial t}(\nabla \times \mathbf{B}), \\ \nabla\left(\frac{\rho}{\epsilon_0}\right) - \nabla^2 \mathbf{E} &= -\frac{\partial}{\partial t}\left(\mu_0 \frac{\partial \mathbf{D}}{\partial t}\right), \\ \nabla^2 \mathbf{E} &= \frac{\partial^2 \mathbf{D}}{\partial t^2}.\end{aligned}\tag{13}$$

Valovno enačbo (13) rešujemo z nastavkom:

$$\begin{aligned}\mathbf{E} &= \mathbf{E}_0 e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} \quad \text{in} \quad \mathbf{D} = \mathbf{D}_0 e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)}, \\ \mathbf{E}_0 e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} (-i\mathbf{k})^2 &= \mu_0 \mathbf{D}_0 e^{-i(\mathbf{k}\mathbf{r} - \omega t)} (i\omega)^2, \\ \mathbf{E} \mathbf{k}^2 &= \mu_0 \omega^2 \mathbf{D}, \\ \mathbf{E} \mathbf{k}^2 &= \mu_0 \omega^2 \epsilon(\omega) \epsilon_0 \mathbf{E}, \\ \epsilon(\omega) &= \frac{\mathbf{k}^2}{\omega^2 \mu_0 \epsilon_0}, \\ \epsilon(\omega) &= \frac{\mathbf{k}^2 c^2}{\omega^2}, \\ \Rightarrow k &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon(\omega)}.\end{aligned}\tag{14}$$

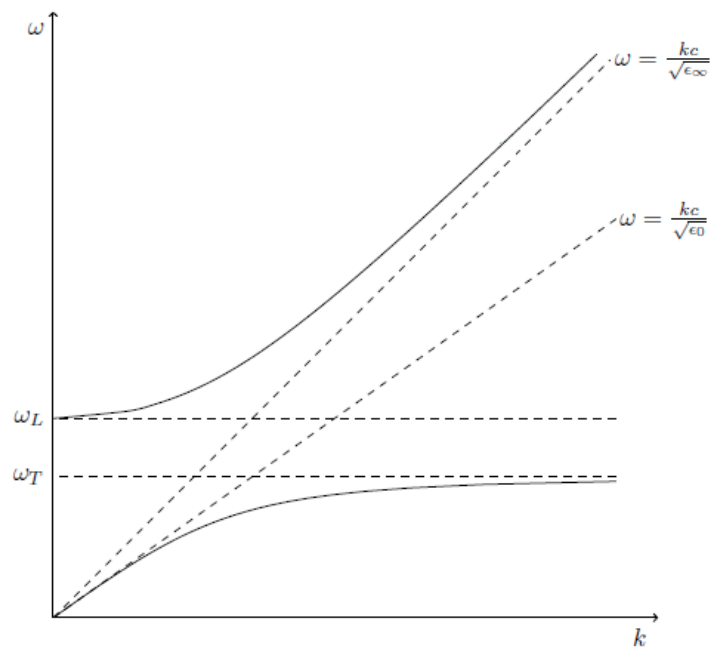
Če v enačbo (14) vstavimo enačbo (8), potem dobimo:

$$k = \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_\infty + \frac{\epsilon_\infty - \epsilon_0}{\frac{\omega^2}{\omega_T^2} - 1}}.\tag{15}$$

Izračunajmo limite enačbe (15):

$$\begin{aligned} \lim_{\omega \rightarrow \infty} k &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_{\infty}} \Rightarrow \omega = \frac{kc}{\sqrt{\epsilon_{\infty}}}, \\ \lim_{\omega \rightarrow 0} k &= \frac{\omega}{c} \sqrt{\epsilon_0} \Rightarrow \omega = \frac{kc}{\sqrt{\epsilon_0}}. \end{aligned} \quad (16)$$

S pomočjo teh limit (16) in relacije $\epsilon(\omega)$ (Slika 2) lahko približno narišemo disperzijsko zvezo za polaritone:



Slika 3: Disperzijska relacija za polaritone.

Viri:

- [1] N. W. Ashcroft, N. D. Mermin, Solid State Physics, 1976.

Del VII

Landauova teorija faznih prehodov

Landauova teorija faznih prehodov v feroelektrikih

FIZIKA KONDENZIRANE SNOVI

Boštjan Mavrič
Ljubljana, 9. maj 2012

1 Naloga

S pomočjo Landauove teorije faznih prehodov izračunaj temperaturno odvisnost polarizacije in dielektrično konstanto za prehode drugega reda.

2 Rešitev

Landauova teorija predpostavlja, da lahko prosto energijo sistema v bližini točke prehoda razvijemo po ureditvenem parametru, tj. neki količini, ki ima nad točko prehoda vrednost 0, pod točko prehoda pa zavzame neko od nič različno vrednost. Ker se ukvarjamo s feroelektrikom, je naravna izbira ureditvenega parametra polarizacija $\mathbf{P}$. Da si obravnavo poenostavimo, predpostavimo, da imamo opravka z dolgo ravno palico, električno polje $\mathbf{E}$, pa je usmerjeno vzdolž njene osi, vzporedno s polarizacijo, tako da je problem enodimenzionalen. Prosto energijo feroelektrika v električnem polju potem zapišemo kot

$$F(p, T, P) = F_0 - VEP + g_1P + \frac{1}{2}g_2P^2 + \frac{1}{3}g_3P^3 + \frac{1}{4}g_4P^4 + \dots \quad (1)$$

Ravnovesno vrednost polarizacije P_s dobimo iz minimuma proste energije

$$\left. \frac{\partial F}{\partial P} \right|_{P_s} = 0 \quad \text{in} \quad \left. \frac{\partial^2 F}{\partial P^2} \right|_{P_s} > 0. \quad (2)$$

Pogoj za minimum proste energije je torej

$$(\alpha E + g_1) + g_2P + g_3P^2 + g_4P^3 + \dots = 0 \quad (3)$$

Poskusimo določiti vrednosti nekaj koeficientov v zgornjem razvoju. Takoj opazimo, da ima enačba rešitev $P = 0$ samo, če je $\alpha E + g_1 = 0$. Takšno rešitev želimo, saj opazujemo fazni prehod feroelektrika, zato v razvoju proste energije (1) opustimo člene linearne v polarizaciji.

Ker želimo, da se pri temperaturi prehoda T_0 točka $P = 0$ spremeniti iz lokalnega minimuma v lokalni maksimum, se mora pri temperaturi T_0 spremeniti predznak člena g_2 . Predpostavimo lahko, da je člen $g_2 = \gamma(T - T_0)$, $\gamma > 0$.

Želimo še, da je stanje s $P = 0$ ravnovesno tudi pri temperaturi prehoda. Iz analize vemo, da ima odvedljiva funkcija v točki x_0 minimum, če za neko liho število n velja, da so vsi odvodi $f^{(k)}(x_0) = 0 \quad \forall \quad k \leq n$ in je $f^{(n+1)}(x) > 0$. Da to dosežemo, mora pri temperaturi T_0 veljati $g_3 = 0$ in $g_4 > 0$. Temu pogoju lahko zadostimo na dva načina. Lahko je pri $T = T_0$ koeficient g_3 enak nič, ker je takšna njegova temperaturna odvisnost, lahko pa je enak nič zaradi simetrijskih lastnosti obravnavanega kristala. V nadaljevanju bomo obravnavali le primer kristala, ki je invarianten na inverzijo prostora, kar pomeni, da v razvoju proste energije (1) lihe potence P ne nastopajo.

2.1 Prehod drugega reda

Za obravnavo prehoda drugega reda je dovolj, da vzamemo razvoj proste energije le do četrtega reda

$$F = \frac{1}{2}\gamma(T - T_0)P^2 + \frac{1}{4}g_4P^4, \quad (4)$$

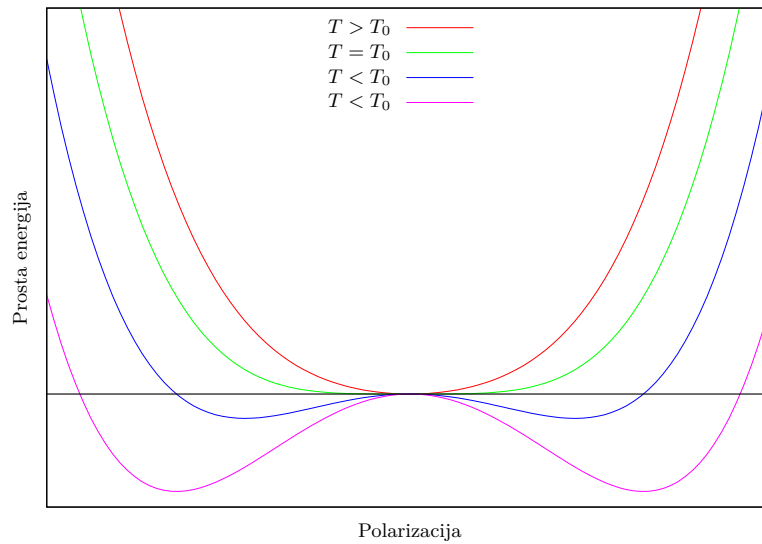
iz česar dobimo pogoj za ravnovesno polarizacijo P_s

$$P_s \left(\gamma(T - T_0) + g_4P_s^2 \right) = 0. \quad (5)$$

Enačba ima dve rešitvi. Če je $T > T_0$ je edina realna rešitev $P_s = 0$, če pa je $T \leq T_0$, potem postane realna tudi rešitev

$$P_s = \pm \sqrt{\frac{\gamma}{g_4}} \sqrt{T_0 - T}. \quad (6)$$

Vidimo, da je v tem primeru T_0 kar enak kritični temperaturi.



Slika 1: Odvisnost proste energije feroelektrika pri faznem prehodu drugega reda.

Za takšen kristal lahko enostavno izračunamo njegovo električno susceptibilnost

$$\chi_e = \frac{1}{\varepsilon} \frac{\partial P}{\partial E}. \quad (7)$$

V ta namen prosto energijo razvijemo do četrtega reda in vanjo vključimo še vpliv zunanjskega polja. Tako dobimo pogoj za ravnovesje

$$-VE + \gamma(T - T_0)P + g_4P^3 = 0. \quad (8)$$

Odvod polarizacije po polju, ki ga potrebujemo pri računanju dielektrične konstante dobimo z odvajanjem zgornje enačbe (8) po E

$$-V + \gamma(T - T_0) \frac{\partial P}{\partial E} + 3g_4P^2 \frac{\partial P}{\partial E} = 0 \quad (9)$$

iz česar izrazimo $\partial P/\partial E$, ki ga vstavimo v definicijo susceptibilnosti (7). Tako dobimo izraz za susceptibilnost

$$\chi_e = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{V}{\gamma(T - T_0) + 3g_4 P^2}. \quad (10)$$

V izrazu nam je ostala polarizacija. Znebimo se je tako, da predpostavimo, da se ravnovesna polarizacija zaradi zunanjega polja le malo spremeni in lahko uporabimo kar izraz za ravnovesno vrednost brez zunanjega polja (6). Tako dobimo končni rezultat

$$\chi_e(T > T_C) = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{V}{\gamma(T - T_0)}, \quad (11)$$

$$\chi_e(T < T_C) = \frac{1}{\varepsilon_0} \frac{V}{2\gamma(T_0 - T)}. \quad (12)$$

2.2 Prehod prvega reda

Prehod prvega reda lahko v Landauovi teoriji obravnavamo na več načinov. Takšen prehod dobimo, če opustimo zahtevo $g_3 = 0$, vendar pa s tem izgubimo simetrijo v rešitvah. To simetrijo ohranimo če predpostavimo, da je koeficient $g_4 < 0$. V tem primeru moramo prosto energijo razviti do šestega reda in zahtevati $g_6 > 0$. Pogoj za ravnovesje tako postane

$$P_s \left(\gamma(T - T_0) + g_4 P_s^2 + g_6 P_s^4 \right) = 0. \quad (13)$$

Poleg trivialne rešitve $P_s = 0$ imamo še rešitvi

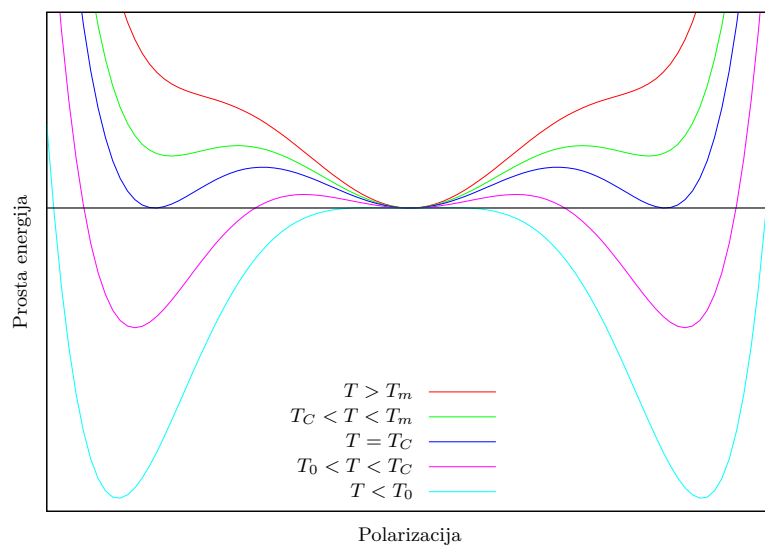
$$P_{s\pm}^2 = \frac{-g_4 \pm \sqrt{g_4^2 - 4g_6\gamma(T - T_0)}}{2g_6}. \quad (14)$$

Ker iščemo minimum proste energije, izberemo rešitev s predznakom $+$, saj se izkaže da rešitev s predznakom $-$ predstavlja lokalni maksimum. Lokalni minimum se v pri polarizaciji P_{s+} pojavi, ko postane $g_4^2 - 4g_6\gamma(T - T_0) > 0$, kar se zgodi pri temperaturi

$$T_m = T_0 + \frac{g_4^2}{4g_6\gamma}. \quad (15)$$

Ker moramo, da dobimo vrednost polarizacije, izraz (14) še koreniti, mora biti vrednost števca večja od 0. Težave s tem pogojem ima le rešitev P_{s-} , kar omeji njen obstoj na temperature večje od T_0 .

Vidimo, da imamo nad temperaturo T_m en globalni minimum pri $P = 0$. Ko je temperatura v območju $T_C < T < T_m$ se pojavita dva lokalna minimuma. Globalni minimum je še vedno v $P = 0$, metastabilno pa je stanje s $P = P_{s+}$. Če temperaturo še naprej nižamo dosežemo temperaturo prehoda T_C , ko je prosta energija v obeh minimumih enaka. Če je temperatura na intervalu $T_0 < T < T_C$, se vlogi stanj zamenjata in postane metastabilno stanje s $P = 0$; ko pa temperatura pade pod T_0 ostane stabilno le stanje $P = P_{s+}$, pri $P = 0$ pa se pojavi lokalni maksimum.



Slika 2: Odvisnost proste energije feroelektrika pri faznem prehodu prvega reda.

Domača naloga

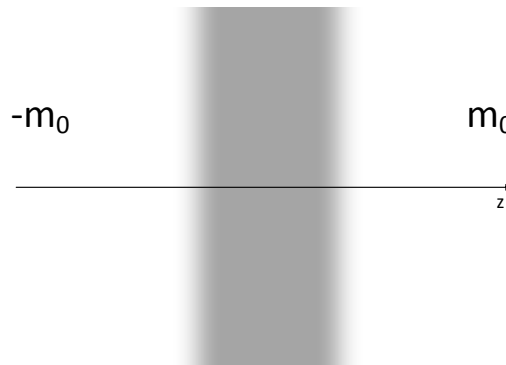
Ginzburg-Landauova teorija domenske stene

Peter Naglič

15. maj 2012

1 Naloga

Zanima nas obnašanje prehodne plasti (domenske stene) med dvema domenama z nasprotno magnetizacijo v feromagnetu (glej sliko 1).



Slika 1: Skica problema.

2 Rešitev

Pojav razložimo s pomočjo Ginzburg-Landauove teorije, kjer zapišemo prosto energijo v obliki

$$F = \int d^3\mathbf{r} \left[\frac{\tilde{a}}{2} (\nabla m)^2 + a m^2(\mathbf{r}) + b m^4(\mathbf{r}) \right], \quad (1)$$

kjer je $\tilde{a} > 0$, $b > 0$ in $a = \gamma(T - T_c)$. Prvi člen nam da pozitiven prispevek, če se magnetizacija spreminja s krajem in tako sili sistem k čim počasnejši spremembi magnetizacije, saj je takrat gradient majhen. Druga dva člena temu nasprotujeta, saj si sistem pod temperaturo faznega prehoda želi imeti magnetizacijo. Z minimizacijo proste energije bomo dobili funkcijo $m(\mathbf{r})$, ki bo kompromis med obema prispevkoma.

Imamo torej variacijski problem

$$F = \int d^3\mathbf{r} f(m(\mathbf{r}), \nabla m), \quad (2)$$

$$\frac{\delta F}{\delta m} = 0 \quad (\text{min}) \quad (3)$$

in od tod dobimo Euler-Lagrangeovo enačbo

$$\frac{\partial f}{\partial m} - \nabla \frac{\partial f}{\partial (\nabla m)} = 0. \quad (4)$$

Ko vstavimo funkcijo f se minimizacija proste energije prevede na reševanje sledeče diferencialne enačbe

$$-\tilde{a} \Delta m(\mathbf{r}) + 2a m(\mathbf{r}) + 4b m^3(\mathbf{r}) = 0. \quad (5)$$

Za naš primer se bo magnetizacija spreminjala le vzdolž osi z in zato prepišemo diferencialno enačbo v obliko

$$-\tilde{a} \frac{\partial^2 m(z)}{\partial z^2} + 2a m(z) + 4b m^3(z) = 0. \quad (6)$$

Pokažimo še, da se funkcija

$$\frac{\tilde{a}}{2} \left(\frac{\partial m(z)}{\partial z} \right)^2 - a m^2(z) - b m^4(z) \quad (7)$$

ohranja vzdolž z :

$$\begin{aligned} \frac{\partial}{\partial z} \left(\frac{\tilde{a}}{2} \left(\frac{\partial m}{\partial z} \right)^2 - a m^2 - b m^4 \right) &= \frac{\tilde{a}}{2} 2 \left(\frac{\partial m}{\partial z} \right) \left(\frac{\partial^2 m}{\partial z^2} \right) - 2a m \frac{\partial m}{\partial z} - 4b m^3 \frac{\partial m}{\partial z} \\ &= \frac{\partial m}{\partial z} \left(\tilde{a} \frac{\partial^2 m}{\partial z^2} - 2a m - 4b m^3 \right) \\ &= 0. \end{aligned} \quad (8)$$

V zadnjem koraku smo upoštevali diferencialno enačbo 6 in dobili res 0. Funkcijo 7 lahko torej enačimo z neko konstanto, ki ni odvisna od z .

$$\frac{\tilde{a}}{2} \left(\frac{\partial m}{\partial z} \right)^2 - a m^2 - b m^4 = C \quad (9)$$

Za boljšo preglednost uvedemo asimptotsko vrednost magnetizacije $m_0 = \sqrt{-a/2b}$ (daleč stran od domenske stene), korelacijsko dolžino $\xi = \sqrt{-\tilde{a}/2a}$, brezdimenzijsko magnetizacijo $\tilde{m} = m/m_0$ in parameter $\tilde{z} = z/\xi$. Tu smo predpostavili, da je $a < 0$, kar pomeni, da smo pod kritično temperaturo. Tako lahko zgornjo enačbo prevedemo na brezdimenzijsko

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{m}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 + \frac{\tilde{m}^2}{2} - \frac{\tilde{m}^4}{4} = C' \quad (10)$$

Konstanto C' lahko določimo iz asimptotskih vrednosti magnetizacije

$$\lim_{\tilde{z} \rightarrow \pm\infty} \left(\frac{\partial \tilde{m}}{\partial \tilde{z}} \right) = 0, \quad (11)$$

$$\lim_{\tilde{z} \rightarrow \pm\infty} \tilde{m}^2 = 1 \quad (12)$$

in dobimo

$$C' = \frac{1}{4}. \quad (13)$$

Sedaj lahko enačbo 10 malo preoblikujemo

$$\frac{1}{2} \left(\frac{\partial \tilde{m}}{\partial \tilde{z}} \right)^2 = \left(\frac{1}{2} - \frac{\tilde{m}^2}{2} \right)^2, \quad (14)$$

in jo korenimo

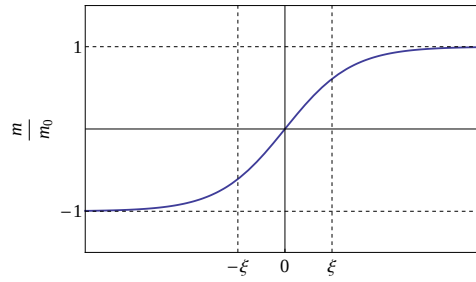
$$\frac{\partial \tilde{m}}{\partial \tilde{z}} = \pm \frac{1}{\sqrt{2}} (1 - \tilde{m}^2). \quad (15)$$

Sedaj pa predpostavimo, da magnetizacija vzdolž osi z narašča in bo torej njen odvod vseskozi pozitiven. Posledično vzamemo le pozitiven predznak. Izraz tako moramo le še integrirati

$$\int_0^{\tilde{m}(z)} \frac{d\tilde{m}}{1 - \tilde{m}^2} = \frac{1}{\sqrt{2}} \int_{\tilde{z}_0}^{\tilde{z}} d\tilde{z}, \quad (16)$$

kjer je $\tilde{z}_0$ mesto na osi z z magnetizacijo 0. Dobimo

$$\operatorname{arctanh} \tilde{m}(z) = \frac{1}{\sqrt{2}} (\tilde{z} - \tilde{z}_0). \quad (17)$$

Slika 2: Odvisnost magnetizacije od koordinate z ($z_0 = 0$).

Končen izraz za magnetizacijo pa je

$$m(z) = m_0 \tanh\left(\frac{z - z_0}{\sqrt{2}\xi}\right). \quad (18)$$

Kot vidimo, nam korelacijska dolžina ξ predstavlja efektivno širino domenske stene. Ko gremo proti kritični temperaturi, začne širina stene divergirati kot

$$\xi = \sqrt{-\frac{\tilde{a}}{\gamma(T - T_c)}}. \quad (19)$$

Del VIII

Superprevodnost

Domača naloga

Londonova enačba za superprevodno plast

Peter Naglič

15. maj 2012

1 Naloga

Imamo neskončno superprevodno plast, omejeno v smeri osi z pri $z = \pm d$, v zunanjem magnetnem polju $\mathbf{B}_0 = B_0 \hat{\mathbf{e}}_x$. Izračunali bomo magnetno polje in gostoto električnega toka v plasti ter susceptibilnost plasti v limitah tanke in debele plasti.

2 Uvod

Pri izpeljavi enačbe Londonov sprva predpostavimo dvotekočinski model, kjer le del prevodnih elektronov prispeva superprevodnem toku. Za te lahko zapišemo gibalno enačbo, ki ne vsebuje disipacije

$$m \frac{d\mathbf{v}_s}{dt} = -e_0 \mathbf{E}, \quad (1)$$

kjer je $\mathbf{E}$ neko trenutno polje, ki inducira tok. Za superprevodni tok velja

$$\mathbf{j}_s = -n_s e_0 \mathbf{v}_s. \quad (2)$$

To vstavimo v prvo enačbo in dobimo

$$\frac{d\mathbf{j}_s}{dt} = \frac{n_s e_0^2}{m} \mathbf{E}. \quad (3)$$

Upoštevamo Maxwellovo enačbo $\nabla \times \mathbf{E} = -\partial \mathbf{B} / \partial t$ v katero vstavimo električno polje iz enačbe 3 ter izpostavimo časovni odvod

$$\frac{\partial}{\partial t} (\nabla \times \mathbf{j}_s + \frac{n_s e_0^2}{m} \mathbf{B}) = 0. \quad (4)$$

Kot vidimo, je izraz v oklepaju konstanten po času. Zaradi Meissnerjevega efekta je ta izraz celo enak nič, saj morajo notranji tokovi povsem izničiti zunanje polje $\mathbf{B}$. Dobimo

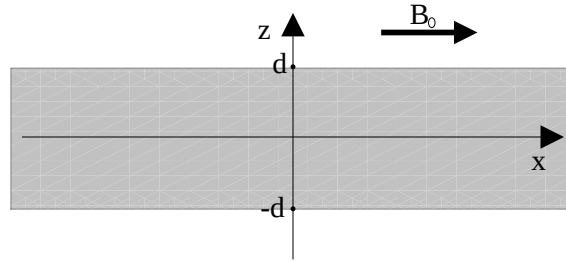
$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{n_s e_0^2}{m} \mathbf{B}. \quad (5)$$

Z upoštevanjem še ene Maxwellove enačbe $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}_s$, pa lahko pridemo do enačbe Londonov

$$\nabla^2 \mathbf{B} = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{B}, \quad (6)$$

kjer je

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s e_0^2}}. \quad (7)$$



Slika 1: Skica problema.

3 Rešitev naloge

Ker zunanje magnetno polje kaže v smeri osi x , lahko enačbo Londonov za polje v plasti zapišemo kot

$$\frac{\partial^2 B_x(z)}{\partial z^2} = \frac{B_x(z)}{\lambda^2}, \quad (8)$$

kjer smo tudi upoštevali, da se spreminja le s koordinato z . Splošna rešitev zgornje diferencialne enačbe je

$$B_x(z) = C \sinh\left(\frac{z}{\lambda}\right) + D \cosh\left(\frac{z}{\lambda}\right). \quad (9)$$

Za določitev konstant pa moramo upoštevati še robne pogoje $B_x(d) = B_x(-d) = B_0$, tako dobimo

$$C = 0 \quad \text{in} \quad D = \frac{B_0}{\cosh\left(\frac{d}{\lambda}\right)}. \quad (10)$$

Končni izraz za magnetno polje v superprevodni plasti je

$$B_x(z) = B_0 \frac{\cosh\left(\frac{z}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{d}{\lambda}\right)}. \quad (11)$$

Sedaj nas pa zanima gostota električnega toka v plasti. Pomagali si bomo z Maxwellovo enačbo $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}_s$. Ko razpišemo rotor, vidimo da je potrebno izračunati le

$$j_{sy} = \frac{1}{\mu_0} \frac{\partial B_x(z)}{\partial z}. \quad (12)$$

Odtod dobimo končen izraz za gostoto električnega toka v superprevodni plasti

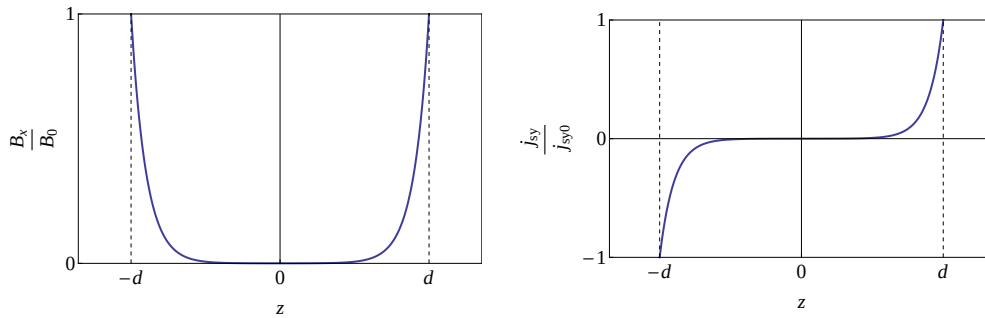
$$j_{sy} = j_{sy0} \frac{\sinh\left(\frac{z}{\lambda}\right)}{\cosh\left(\frac{d}{\lambda}\right)}, \quad (13)$$

kjer je $j_{sy0} = B_0/\mu_0\lambda$. Poglejmo še magnetizacijo:

$$M_x(z) = \frac{1}{\mu_0} (B_x(z) - B_0). \quad (14)$$

Za izračun susceptibilnosti bomo potrebovali povprečno magnetizacijo

$$\begin{aligned} \overline{M}_x &= \frac{1}{2d} \int_{-d}^d M_x(z) dz \\ &= \frac{1}{2d\mu_0} \int_{-d}^d (B_x(z) - B_0) dz \\ &= \frac{B_0}{\mu_0} \left(\frac{\lambda}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda}\right) - 1 \right). \end{aligned} \quad (15)$$



Slika 2: Odvisnost magnetnega polja in gostote električnega polja znotraj superprevodne plasti. Debelina je $d = 10\lambda$.

Susceptibilnost pa potem dobimo kot

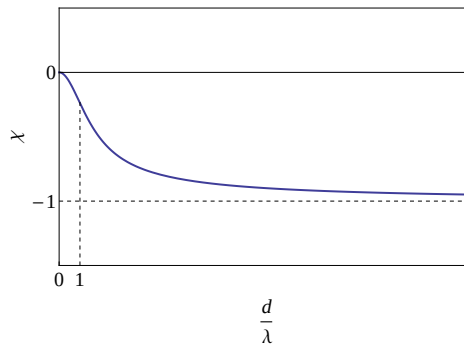
$$\begin{aligned}\chi &= \mu_0 \frac{\overline{M}_x}{B_0} \\ &= \frac{\lambda}{d} \tanh\left(\frac{d}{\lambda}\right) - 1.\end{aligned}\quad (16)$$

Za tanke plasti ($d \ll \lambda$) lahko $\tanh(d/\lambda)$ razvijemo in dobimo

$$\begin{aligned}\chi &\cong \frac{\lambda}{d} \left(\frac{d}{\lambda} - \frac{d^3}{3\lambda^3} \right) - 1 \\ &= -\frac{1}{3} \left(\frac{d}{\lambda} \right)^2.\end{aligned}\quad (17)$$

Za debele plasti ($d \gg \lambda$) pa vemo, da je $\tanh(d/\lambda \rightarrow \infty) \cong 1$ in tako

$$\begin{aligned}\chi &\cong \frac{\lambda}{d} - 1 \\ &\cong -1.\end{aligned}\quad (18)$$



Slika 3: Splošna odvisnost susceptibilnosti od debeline plasti v primerjavi z vdorno globino.

Domača naloga Kritični tok v cilindrični žici

Peter Naglič

15. maj 2012

1 Naloga

Po cilindrični supereprevodni žici z radijem R teče kritični tok I_c , ki na robu žice ustvarja ravno kritično jakost magnetnega polja H_c . Zanima nas porazdelitev gostote električnega toka in magnetnega polja znotraj žice. Ugotoviti pa želimo tudi zvezo med kritičnim tokom I_c in kritičnim poljem H_c .

2 Rešitev naloge

Pri tej nalogi najprej izpeljemo enačbo Londonov za gostoto električnega toka. Začnemo z enačbo (za izpeljavo glej prejšnjo nalogo)

$$\nabla \times \mathbf{j}_s = -\frac{n_s e_0^2}{m} \mathbf{B}, \quad (1)$$

kjer je m masa elektrona, n_s številska gostota superprevodnih elektronov in e_0 osnovni naboj. Na zgornjo enačbo delujemo z rotorjem, upoštevamo Maxwellovo enačbo $\nabla \times \mathbf{B} = \mu_0 \mathbf{j}_s$ in tako dobimo enačbo Londonov

$$\nabla^2 \mathbf{j}_s = \frac{1}{\lambda^2} \mathbf{j}_s, \quad (2)$$

kjer je

$$\lambda = \sqrt{\frac{m}{\mu_0 n_s e_0^2}}. \quad (3)$$

Zaradi cilindrične geometrije problema vidimo, da je gostota električnega toka odvisna le od radija in je oblike

$$\mathbf{j}_s = j(r) \hat{\mathbf{e}}_z. \quad (4)$$

Enačba 2 se z upoštevanjem cilindričnih koordinat in oblike nastavka poenostavi v

$$\frac{1}{r} \frac{d}{dr} \left(r \frac{dj(r)}{dr} \right) = \frac{j(r)}{\lambda^2}. \quad (5)$$

To malo preoblikujemo in dobimo

$$x^2 \frac{d^2 j}{dx^2} + x \frac{dj}{dx} - x^2 j = 0, \quad (6)$$

kjer je $x = r/\lambda$. Splošna Besselova diferencialna enačba je

$$y^2 \frac{d^2 j}{dy^2} + y \frac{dj}{dy} + (y^2 - \alpha^2) j = 0, \quad (7)$$

katere rešitve so Besselove $J_\alpha(y)$ in Neumannove funkcije $Y_\alpha(y)$. Da dobimo nazaj našo enačbo, moramo vzeti $y = ix$ in $\alpha = 0$. Rešitev diferencialne enačbe 6 je

$$j(r) = C J_0 \left(i \frac{r}{\lambda} \right) + D Y_0 \left(i \frac{r}{\lambda} \right). \quad (8)$$

Formalno se tem funkcijam z imaginarnim argumentom reče prirejene Besselove funkcije in se jih označi kot:

$$\begin{aligned} I_\alpha(x) &= i^{-\alpha} J_\alpha(ix), \\ K_\alpha(x) &= \frac{\pi}{2} \frac{I_{-\alpha}(x) - I_\alpha(x)}{\sin(\alpha\pi)}. \end{aligned} \quad (9)$$

Določimo sedaj konstanti C in D . Funkcija $Y_0(ir/\lambda)$ divergira, ko gre $r \rightarrow 0$, zato postavimo $D = 0$. Konstanto C pa lahko določimo s celotnim tokom I_c , ki teče po žici. Gostoto električnega toka moramo integrirati po preseku žice

$$\begin{aligned} I_c &= \int_0^R j(r) 2\pi r dr \\ &= 2\pi C \int_0^R J_0\left(i\frac{r}{\lambda}\right) r dr \\ &= -2\pi C \lambda^2 \int_0^{i\frac{R}{\lambda}} J_0(u) u du \\ &= -2\pi C \lambda^2 i \frac{R}{\lambda} J_1\left(i\frac{R}{\lambda}\right) \\ &= 2\pi R C \lambda I_1\left(\frac{R}{\lambda}\right). \end{aligned} \quad (10)$$

Iz tega sledi, da je konstanta C

$$C = \frac{I_c}{2\pi R \lambda I_1\left(\frac{R}{\lambda}\right)}. \quad (11)$$

Tako je končni izraz za gostoto električnega toka

$$\mathbf{j}_s(r) = \frac{I_c}{2\pi R \lambda} \frac{I_0\left(\frac{r}{\lambda}\right)}{I_1\left(\frac{R}{\lambda}\right)} \hat{\mathbf{e}}_z, \quad (12)$$

kjer smo pisali $I_0(r/\lambda) = J_0(ir/\lambda)$.

Sedaj lahko s pomočjo enačbe 1 določimo magnetno polje znotraj žice

$$\mathbf{B} = -\frac{m}{n_s e_0^2} \nabla \times \mathbf{j}_s \quad (13)$$

Ko razpišemo rotor v cilindričnih koordinatah in upoštevamo odvisnost ter smer gostote električnega toka, nam ostane le

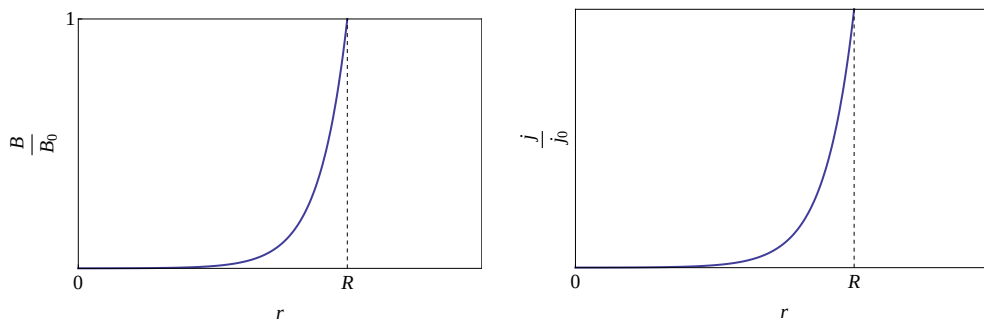
$$\begin{aligned} \mathbf{B}(r) &= \frac{m}{n_s e_0^2} \frac{dj(r)}{dr} \hat{\mathbf{e}}_\varphi \\ &= \frac{m}{n_s e_0^2} \frac{I_c}{2\pi R \lambda I_1\left(\frac{R}{\lambda}\right)} \frac{dJ_0\left(i\frac{r}{\lambda}\right)}{dr} \hat{\mathbf{e}}_\varphi. \end{aligned} \quad (14)$$

Odvod lahko izračunamo z upoštevanjem naslednjih identitet za Besselove funkcije

$$\begin{aligned} \frac{d(x^\alpha J_\alpha)}{dx} &= x^\alpha J_{\alpha-1}, \\ J_{-\alpha} &= (-1)^\alpha J_\alpha. \end{aligned} \quad (15)$$

Tako dobimo

$$\begin{aligned} \frac{dJ_0\left(i\frac{r}{\lambda}\right)}{dr} &= \frac{1}{\lambda} i^{-1} J_1\left(i\frac{r}{\lambda}\right) \\ &= \frac{1}{\lambda} I_1\left(\frac{r}{\lambda}\right). \end{aligned} \quad (16)$$



Slika 1: Odvisnost magnetnega polja in gostote električnega polja znotraj superprevodne cilindrične žice. Polmer je $R = 10\lambda$.

Magnetno polje znotraj žice je

$$\mathbf{B}(r) = \frac{I_c \mu_0}{2\pi R} \frac{I_1\left(\frac{r}{\lambda}\right)}{I_1\left(\frac{R}{\lambda}\right)} \hat{\mathbf{e}}_\varphi. \quad (17)$$

Na robu žice je magnetno polje ravno enako kritičnemu polju $B(r) = \mu_0 H_c$ in od tod dobimo povezavo med kritičnim tokom in kritičnim poljem

$$I_c = 2\pi R H_c. \quad (18)$$

Do iste povezave bi lahko prišli tudi z Amperovim zakonom

$$I_c = \oint \mathbf{H} \cdot d\mathbf{l} = 2\pi R H_c. \quad (19)$$

Če teče po žici kritični tok, magnetno polje na robu superprevodnika doseže ravno kritično vrednost, pri kateri se superprevodnost podre in žica preide v normalno stanje.

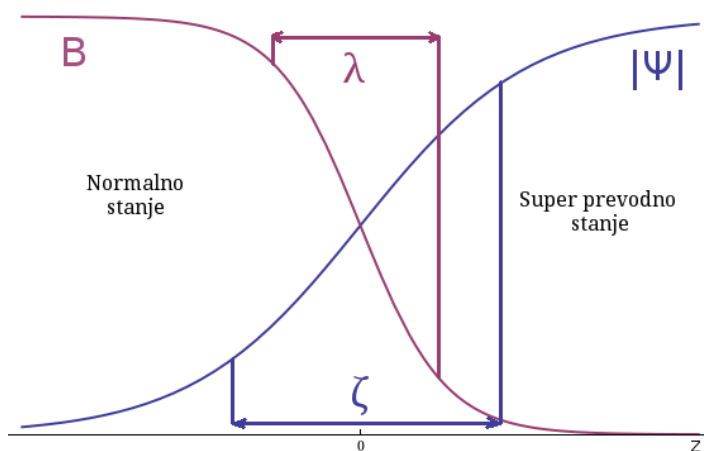
Domenska stena na stiku navadnega in superprevodnega stanja

David Fabijan
28112026

22. maj 2012

1 Naloga

Zanima nas pri kakšnih pogojih je za superprevoden sistem ugodno da vsebuje domensko steno, ki ga ločuje na superprevoden in navaden del.



2 Rešitev

Pogoj, ki mora biti izpolnjen za nastanek domenske stene je nižja prosta entalpija v sistemu z steno kot v sistemu brez stene. Prav tako stena v materialu ne more nastati, če polje zunaj ni kritično ($B(z \rightarrow -\infty) = B_c$).

Ker nas v končni fazi zanima le predznak proste entalpije, se v principu lahko zadovoljimo z prosto entropijo na enoto površine, kar nam problem reducira na enodimenzionalnega. Iskano količino lahko zapišemo kot:

$$\frac{\Delta G}{S} = \int dz \left[\alpha |\psi|^2 + \frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar \nabla - e^* \vec{A} \right) \psi \right|^2 + \frac{B^2}{2\mu_0} - H_c B + \frac{B_c^2}{2\mu_0} \right]. \quad (1)$$

Faktor H_c , ki nastopa kot del proste entalpije območja je definiran kot $B_c \mu_0$. Nadalje si pomagamo z Ginzburg-Landauovo relacijo ki pravi:

$$\alpha \psi + \beta |\psi|^2 \psi + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \nabla - e^* \vec{A} \right)^2 \psi = 0. \quad (2)$$

Da lahko to realcijo uporabimo jo na obeh straneh pomnožimo z ψ^* in integriramo po z . Sledi:

$$\int \alpha |\psi|^2 + \beta |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left[\left(-i\hbar \nabla - e^* \vec{A} \right)^2 \psi \right] \psi^* dz = 0, \quad (3)$$

$$\int \alpha |\psi|^2 + \beta |\psi|^4 + \frac{1}{2m^*} \left| \left(-i\hbar \nabla - e^* \vec{A} \right) \psi \right|^2 dz = 0. \quad (4)$$

Korak med 3. in 4. enačbo lahko izvedemo zaradi hermitske narave ψ^* .

Z vstavljanjem enačbe 4 v 2, dobimo izraz:

$$\frac{\Delta G}{S} = \int dz \left[-\frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{B^2}{2\mu_0} - H_c B + \frac{B_c^2}{2\mu_0} \right]. \quad (5)$$

Z upoštevanjem izraza za H_c vidimo da lahko sedaj vse od polja odvisne člene združimo pod popoln kvadrat:

$$\frac{\Delta G}{S} = \int dz \left[-\frac{\beta}{2} |\psi|^4 + \frac{1}{2\mu_0} (B - B_c)^2 \right]. \quad (6)$$

Ta izraz lahko še nekoliko polepšamo, če uporabimo na predavanjih izpeljano zvezo za kritično polje:

$$B_c = \sqrt{\mu_0 \frac{\alpha^2}{\beta}} = \sqrt{\mu_0 |\psi_0|^4 \beta} \quad (7)$$

Končamo torej z:

$$\frac{\Delta G}{S} = \int dz \left[-\frac{B_c^2}{2\mu_0 |\psi_0|^4} |\psi|^4 + \frac{B_c^2}{2\mu_0} \left(\frac{B}{B_c} - 1 \right)^2 \right]. \quad (8)$$

$$\frac{\Delta G}{S} = \frac{B_c^2}{2\mu_0} \int dz \left[\left(\frac{B}{B_c} - 1 \right)^2 - \left| \frac{\psi}{\psi_0} \right|^4 \right]. \quad (9)$$

Sedaj pa moramo še nekako oceniti vrednost tega integrala. Vemo da bo predfaktor vedno pozitiven, tak da ta ne bo vplival na predznak. Za velike x bo $|\psi| = |\psi_0|$ in $B = 0$, kar nam da 0 pod integralom. Prav tako bo za $x \rightarrow -\infty$ veljalo da je $|\psi| = 0$ in $B = B_c$ kar nam ponovno da 0. Zanimive stvar se torej dogajajo le v okolici prehoda. Grobo ocenimo da je prispevek valovne funkcije kar enak korelacijski dolžini ζ in prispevek magnetnega polja udorni globini λ .

$$\frac{\Delta G}{S} = \frac{B_c^2}{2\mu_0} (\zeta - \lambda). \quad (10)$$

Iz tega lahko razberemo da bo nastanek stene možen (entalpija bo negativna) če bo udorna globina mnogo manjša od korelacijske dolžine $\zeta \ll \lambda$ in obratno bo nastanek stene zelo neugoden če bo veljalo $\zeta \gg \lambda$. To lahko izrazimo tudi z uporabo Ginzburg-Landauovega parametra $\kappa = \lambda/\zeta$, ki ga ocenimo na več kot 1 za ugodno in manj kot 1 za neugodno stanje. Natančna mejna vrednost za $\kappa = 1/\sqrt{2}$, kar je pokazano pri nalogi “Določanje drugega kritičnega polja (B_{c2}) v superprevodniku tipa II”.

Določanje drugega kritičnega polja (B_{c2}) v superprevodniku tipa II

David Fabijan
28112026

22. maj 2012

1 Naloga

Pri superprevodniku drugega tipa obstajata dve temperaturno odvisni kritični magnetni polji. Pri prvi vrednosti polja, ki je bila izpeljana na predavanjih, dobimo udar magnetnega polja v superprevodno snov. Magnetno polje prebada superprevodnik v obliki niti, ki se z večanjem magnetnega polja gostijo dokler pri kritičnem polju B_{c2} ne pride do popolnega porušanja superprevodnega stanja. Namen te naloge je določitev tega magnetnega polja.

2 Rešitev

Postopek reševanja začnemo z Ginzburg-Landauovo relacijo:

$$\alpha\psi + \beta|\psi|^2\psi + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A} \right)^2 \psi = 0. \quad (1)$$

Vendar pa ker vemo da bo ob kritičnem polju valovna funkcija zelo majhna, si lahko privoščimo poenostavitev v obliki:

$$\alpha\psi + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A} \right)^2 \psi = 0. \quad (2)$$

Sedaj pa moramo izbrati še primerno polje $\vec{A}$. Kot dober izbor se izkaže polje v obliki $\vec{A} = (0, B\mathbf{x}, 0)$, ki nam po aplikaciji rotorja da polje:

$$\vec{A} = \nabla \times \vec{A} = (0, 0, B). \quad (3)$$

Ko upoštevamo da je faktor α negativen ter razpišemo kvadratni člen dobimo sledečo enačbo:

$$\begin{aligned} |\alpha|\psi &= \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar\nabla - e^*\vec{A} \right)^2 \psi = \\ &= \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial z^2} \psi + \frac{1}{2m^*} \left(-i\hbar \frac{\partial}{\partial y} - e^*Bx \right)^2 \psi + \frac{-\hbar^2}{2m^*} \frac{\partial^2}{\partial x^2} \psi. \end{aligned} \quad (4)$$

Rešitev te parcialne diferencialne enačbe iščemo z nastavkom, ki predstavlja ravni valovanje v dveh smereh ter je prosta funkcija v smeri $\mathbf{x}$. Torej je oblike $\psi = e^{ik_z z} e^{ik_y y} \varphi(x)$. Ko s tem nastavkom vstopimo v enačbo 4:

$$\begin{aligned} |\alpha|\varphi(x) &= \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \varphi(x) + \frac{1}{2m^*} (\hbar k_y - e^*Bx)^2 \varphi(x) + \frac{-\hbar^2}{2m^*} \varphi''(x) \\ |\alpha|\varphi(x) &= \frac{-\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \varphi(x) + \frac{(e^*B)^2}{2m^*} \left(x - \frac{\hbar k_y}{e^*B} \right)^2 \varphi(x) + \frac{-\hbar^2}{2m^*} \varphi''(x). \end{aligned} \quad (5)$$

Če sedaj uvedemo še dve novi oznaki in sicer $\tilde{x} = x - \frac{\hbar k_y}{e^*B}$ in ciklotronsko frekvenco $\omega_c = \frac{e^*B}{m^*}$. Ker je $\tilde{x}$ le premaknjen x lahko zamenjamo vse $\varphi(x)$ z $\varphi(\tilde{x})$ in dobimo:

$$\frac{\omega_c m^*}{2} \tilde{x}^2 \varphi(\tilde{x}) - \frac{\hbar^2}{2m^*} \varphi''(\tilde{x}) = \varphi(\tilde{x}) \left(|\alpha| - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*} \right). \quad (6)$$

V tej enačbi pa sedaj že prepoznamo harmonski oscilator, čigar rešitev nam je dobro znana:

$$\left(n + \frac{1}{2} \right) \hbar \omega_c = |\alpha| - \frac{\hbar^2 k_z^2}{2m^*}. \quad (7)$$

Možne vrednosti za n so $0, 1, 2, 3, \dots$ nas pa zanima maksimalen možno polje B , ki smo ga skrili v ciklotronsko frekvenco. Če ga želimo poiskati moramo maksimirati ω_c , kar dosežemo če postavimo n in k_z na 0. Potem sledi:

$$\begin{aligned} \frac{1}{2} \hbar \omega_c &= |\alpha| \\ \frac{1}{2} \hbar \frac{e^* B_{c2}}{m^*} &= |\alpha| \\ B_{c2} &= \frac{2|\alpha|m^*}{\hbar e^*} \end{aligned} \quad (8)$$

Dobljeni razultat pa se navezuje tudi na nalogo “Domenska stena na stiku navadnega in superprevodnega stanja”. Material, ki bi imel drugo kritično polje ravno enako prvemu, bi bil namreč natanko tisti pri katerem bi domenska stena postala ugodna. Če torej rečemo:

$$B_c = B_{c2} \quad (9)$$

$$\frac{2|\alpha|m^*}{\hbar e^*} = \sqrt{\mu_0 \frac{\alpha^2}{\beta}} \quad (10)$$

$$\left(\frac{2|\alpha|m^*}{\hbar e^*} \right)^2 = \frac{\mu}{\beta}$$

Ko uporabimo še vrednosti za korelacijsko dolžino $\zeta = \sqrt{\frac{\hbar^2}{2m^*|\alpha|}}$ in udorno globino $\lambda = \sqrt{\frac{m^*|\beta|}{\mu_0 e^{*2}|\alpha|}}$. Ugotovimo da se enačba 10 poenostavi v $\kappa = \sqrt{2}$, kar je resnično mejna vrednost in tudi dokaj blizu naše grobe ocene iz prej omenjene naloge ($\kappa \approx 1$).