Ferimagnet v približku povprečnega polja

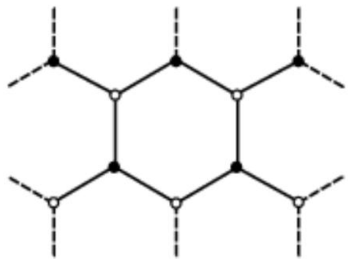
Fizika kondenzirane snovi

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

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

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:

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

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.

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

Indeksa i in j lahko v prvem delu hamiltoniana zamenjam, saj sta nema, 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 najbižjih 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.

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

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

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

Povprečen spin substituiramo z magnetizacijo[1] ker nam bo to v nadalje koristilo

$$\mathbf{M}_A = -\frac{g_a \mu_b N}{V} \langle \mathbf{S}_A \rangle, \quad \mathbf{M}_B = -\frac{g_a \mu_b N}{V} \langle \mathbf{S}_B \rangle. \tag{6}$$

Uvedemo tudi permeabilnosti μ^A in μ^B

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

in efektivno magnetno polje

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

Tedaj naš hamiltonjan izgleda takole

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

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

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

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.

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

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 $\Xi_B = [(2j_B + 1)^4 - 1] g_B^4 \mu_B^4 N_B \mu_0 / 720 V k_b^3$.

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

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

3 Kritična temperatura

Postavimo zunanje polje $\mathbf{B}_0$ na 0 in poglejmo 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:

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

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 $\chi_A = \mu_0 \left.\frac{\partial \mathbf{M}_A}{\partial \mathbf{B}_0}\right|_{B_0 \to 0}$ in podobno za B. Tako dobimo

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

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

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

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

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

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 podmrežah enaki in velja $C_A = C_B = C$ in $\mu^A = \mu^B = \mu$. Tedaj dobimo za susceptibilnost

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

ki pa očitno nima več divergence 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).