Ferimagnet v približku povprečnega polja
Fizika kondenzirane snovi

Gašper Murn

11. januar 2017

1 Naloga

Imejmo kristal, ki je sestavljeni iz dveh vrst ionov z različnim spinom. Ioni naj bodo razporejeni v tako imenovano biparitno mrežo, kjer najbližja sosednja iona nikoli nista iste vrste. Za takšen model hočemo izračunati magnetizacijo in magnetno susceptibilnost.

2 Heisenbergov model za ferimagnet

Z izotropnim Heisenbergovim modelom opišemo interakcije v ferimagnetu

$$H = J \sum_{<ij>} \vec{s}_i \vec{s}_j + g_0 \mu_B \sum_i \vec{s}_i \vec{B}_0$$

V prvi vsoti smo zaradi $< ij >$ upoštevali le najblišje sosede delcev. Tega hamiltoniana ne znamo rešiti v splošnem, zato se poslužimo približka povprečnega polja.

$$\vec{s}_i \vec{s}_j = \langle \vec{s}_i \rangle \vec{s}_j + \vec{s}_i \langle \vec{s}_j \rangle + \langle \vec{s}_i \rangle \langle \vec{s}_j \rangle$$

Zadnji produkt v zgornji enačbi prispeva le k energiji in ne k magnetizaciji ali susceptibilnosti ter ga zato izpustimo iz nadaljne obravnave.

$$H = J \sum_{<ij>} (\langle \vec{s}_i \rangle \vec{s}_j + \vec{s}_i \langle \vec{s}_j \rangle) + g_0 \mu_B \sum_i \vec{s}_i \vec{B}_0$$

Ker sta indeksa i in j nema jih lahko zamenjamo, kar pomeni da lahko zapišemo enakost

$$\langle \vec{s}_i \rangle \vec{s}_j + \vec{s}_i \langle \vec{s}_j \rangle = 2 \vec{s}_i \langle \vec{s}_j \rangle$$

Vsoto po parih najbližjih sosedov lahko zapišemo tudi kot dvojno vsoto, vendar pri tem vsak delec štejemo dvakrat, čemur se ognemo s faktorjem $\frac{1}{2}$.

$$H = \sum_i g_0 \mu_B \vec{s}_i \Big(\frac{J}{g_0 \mu_B} \sum_{jn.s.i} \langle \vec{s} \rangle + \vec{B}_0 \Big)$$

Sedaj naj vsi spini kristalne podmreže z enakimi ioni kažejo v isto smer. Odvisno v kateri kristalni mreži se spin nahaja dobimo povprečni spin kot $\langle \vec{s}_A \rangle$ ali $\langle \vec{s}_B \rangle$. Vsoto po najbližjih sosedih lahko za vsako podmrežo zapišemo posebej. Dobimo vsoto po ionih v kristalni podmreži A, ki imajo za najbližje sosede le delce v B in vsoto po ionih v kristalni podmreži B, ki imajo za najbližje sosede le delce v kristalni podmreži A.

$$H = \sum_{i \epsilon A} g_A \mu_B \vec{s}_i \Big(\frac{J}{g_A \mu_B} \sum_{jn.s.i} \langle \vec{s}_B \rangle + \vec{B}_0 \Big) + \sum_{i \epsilon B} g_B \mu_B \vec{s}_i \Big(\frac{J}{g_B \mu_B} \sum_{jn.s.i} \langle \vec{s}_A \rangle + \vec{B}_0 \Big)$$

Tu Z_B predstavlja število enakih povprečnih spinov ionov iz kristalne podmreže B, ki so najbližji sosedi ionom iz kristalne podmreže A.

$$H = \sum_{i\epsilon A} g_A\mu_B\vec{s}_i(\frac{JZ_B}{g_A\mu_B}\langle\vec{s}_B\rangle + \vec{B}_0) + \sum_{i\epsilon B} g_B\mu_B\vec{s}_i(\frac{JZ_A}{g_B\mu_B}\langle\vec{s}_A\rangle + \vec{B}_0)$$

Uvedemo magnetizacijo,

$$\vec{M}_A = -\frac{g_A\mu_B N}{V}\langle\vec{s}_A\rangle, \qquad \vec{M}_B = -\frac{g_B\mu_B N}{V}\langle\vec{s}_B\rangle$$

permabilnost,

$$\mu^A = \frac{JZ_AV}{\mu_0 g_A g_B \mu_B^2 N} \qquad \mu^B = \frac{JZ_BV}{\mu_0 g_A g_B \mu_B^2 N}$$

ter efektivno magnetno polje

$$\vec{B}_A^{eff} = \vec{B}_0 - \mu_0\mu^B\vec{M}_B \qquad \vec{B}_B^{eff} = \vec{B}_0 - \mu_0\mu^A\vec{M}_A$$

Z magnetizacijo zapišemo povprečni spin ter dobimo naslednji hamiltonian:

$$H = \sum_{i\epsilon A} g_A\mu_B\vec{s}_i\vec{B}_A^{eff} + \sum_{i\epsilon B} g_B\mu_B\vec{s}_i\vec{B}_B^{eff}$$

Le ta je podoben hamiltonianu pri paramagnetu, kar nam da rešitev v obliki Brillouinovih funkcij.

$$\vec{M}_A = \frac{g_A\mu_B N_A j_A}{V} B_{jA}(\frac{g_A\mu_B j_A B_A^{eff}}{k_BT})\frac{\vec{B}_A^{eff}}{\|\vec{B}_A^{eff}\|} \qquad \vec{M}_B = \frac{g_B\mu_B N_B j_B}{V} B_{jB}(\frac{g_B\mu_B j_B B_B^{eff}}{k_BT})\frac{\vec{B}_B^{eff}}{\|\vec{B}_B^{eff}\|}$$

Da lahko rešimo to enačbo razvijemo Brillouinovo funkcijo za majhne argumente tako, da se omejimo na visoke temperature ali pa na majhna polja v bližini kritične temperature.

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

Z razvojem do Brillouinove funkcije 2. reda ponovno zapišemo enačbi za magnetizacijo, poleg pa še uvedemo:

$$C_A = \mu_0\frac{N_A g_A^2 j_A(j_A+1)\mu_B^2}{3k_BV} \qquad C_B = \mu_0\frac{N_B g_B^2 j_B(j_B+1)\mu_B^2}{3k_BV}$$

$$\vec{M}_A = \frac{1}{\mu_0}\frac{C_A}{T}\vec{B}_A^{eff} - \frac{(2j_A+1)^4-1}{720}\frac{g_A^4\mu_B^4 N_A}{k_B^3T^3}\|\vec{B}_A^{eff}\|^2\vec{B}_A^{eff}$$

$$\vec{M}_B = \frac{1}{\mu_0}\frac{C_B}{T}\vec{B}_B^{eff} - \frac{(2j_B+1)^4-1}{720}\frac{g_B^4\mu_B^4 N_B}{k_B^3T^3}\|\vec{B}_B^{eff}\|^2\vec{B}_B^{eff}$$

3 Kritična temperatura

V odsotnosti zunanjega magnetnega polja $\vec{B}_0 = 0$ ponovno zapišemo zgornji enačbi in pri tem pozabimo na smeri.

$$M_A = \frac{1}{\mu_0}\frac{C_A}{T}(-\mu_0\mu^B)M_B - \frac{(2j_A+1)^4-1}{720}\frac{g_A^4\mu_B^4 N_A}{k_B^3 T^3}(\mu_0\mu^B)^3\|M_B\|^2(-M_B)$$

$$M_B = \frac{1}{\mu_0}\frac{C_B}{T}(-\mu_0\mu^A)M_A - \frac{(2j_B+1)^4-1}{720}\frac{g_B^4\mu_B^4 N_B}{k_B^3 T^3}(\mu_0\mu^A)^3\|M_A\|^2(-M_A)$$

Najlažje je če kot pri nalogi "Feromagnet v približku magnetnega polja" skiciramo graf na katerega narišemo obe zgornji enačbi ter raziščemo netrivialne rešitve (to so presečišča grafov, ki niso v ničli). Ob dovolj veliki začetni strmini, k kateri pozitivno prispeva linearni del, pride pri določenih temperaturah do presečišča. S T_C smo označili kritično temperaturo, pri kateri še pride do presečišča.

$$M_A = \lambda_1 M_B \qquad M_B = \lambda_2 M_A$$

$$\lambda_1 = \frac{1}{\lambda_2}$$

$$\frac{1}{\mu_0}\frac{C_A}{T_C}(-\mu_0\mu^B) = \frac{1}{\frac{1}{\mu_0}\frac{C_B}{T_C}(-\mu_0\mu^A}$$

$$T_C = \sqrt{C_A C_B \mu^A \mu^B}$$

4 Magnetna susceptibilnost

Sedaj vzamemo enačbi za magnetizacijo, ki sta razviti le do prvega reda ter s pomočjo $\chi = \mu_0\frac{\partial M}{\partial B_0}|_{B_0\to 0}$ izračunajmo magnetno susceptibilnost.

$$\vec{M}_A = \frac{1}{\mu_0}\frac{C_A}{T}\vec{B}_A^{eff} = -\frac{C_A\mu^B}{T}\vec{M}_B + \frac{C_A}{\mu_0 T}\vec{B}_0 \qquad \vec{M}_B = \frac{1}{\mu_0}\frac{C_B}{T}\vec{B}_B^{eff} = -\frac{C_B\mu^A}{T}\vec{M}_A + \frac{C_B}{\mu_0 T}\vec{B}_0$$

Enačbi zapišemo v matrični obliki

$$\begin{pmatrix} 1 & \frac{C_A\mu^B}{T} \\ \frac{C_B\mu^A}{T} & 1 \end{pmatrix}\begin{pmatrix}\vec{M}_A\\ \vec{M}_B\end{pmatrix} = \frac{1}{\mu_0 T}\begin{pmatrix}C_A\vec{B}_0\\ C_B\vec{B}_0\end{pmatrix}$$

$$\begin{pmatrix}\vec{M}_A\\ \vec{M}_B\end{pmatrix} = \frac{T}{T^2-T_C^2}\frac{1}{\mu_0}\begin{pmatrix}(C_A - \frac{C_B C_A\mu^B}{T})\vec{B}_0\\ (-\frac{C_A C_B\mu^A}{T} + C_B)\vec{B}_0\end{pmatrix}$$

Nato magnetizaciji posameznih podmrež seštejemo, da dobimo celotno magnetizacijo, ki jo nato po formuli za susceptibilnost odvajamo.

$$\vec{M} = \vec{M}_A + \vec{M}_B$$

$$\vec{M} = \frac{T}{T^2 - T_C^2}\frac{1}{\mu_0}[C_A + C_B - (\frac{1}{\mu^A} + \frac{1}{\mu^B})\frac{T_C^2}{T}]\vec{B}_0$$

Opazimo, da ima susceptibilnost pri kritični temperaturi divergenco.

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

V primer, ko so ioni v obeh podmrežah enaki velja $C_A = C_B = C$ in $\mu^A = \mu^B = \mu$. Za susceptibilnost dobimo naslednji rezultat, ki izgubi divergenco pri kritični temperaturi.

$$\chi_{af} = \frac{2C}{T + T_C}$$

Taka oblika susceptibilnosti je značilna za antiferomagnete. S predpostavko, da so ioni v obeh podmrežah enaki, se je primer zreduciral nazaj na antiferomagnet, saj smo na začetku vzeli Heisenbergov model za antiferomagnet.