

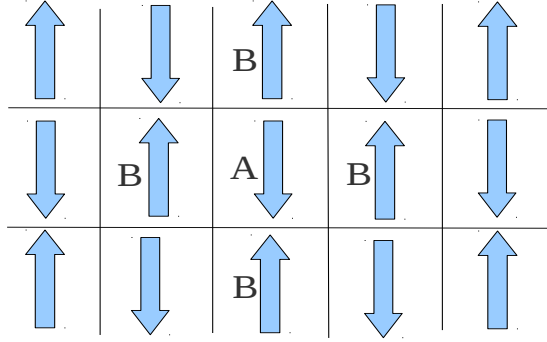
Susceptibilnost antiferomagneta pod Néelovo temperaturo

Jure Zmrzlikar

1 Antiferomagnet → 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:

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

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:

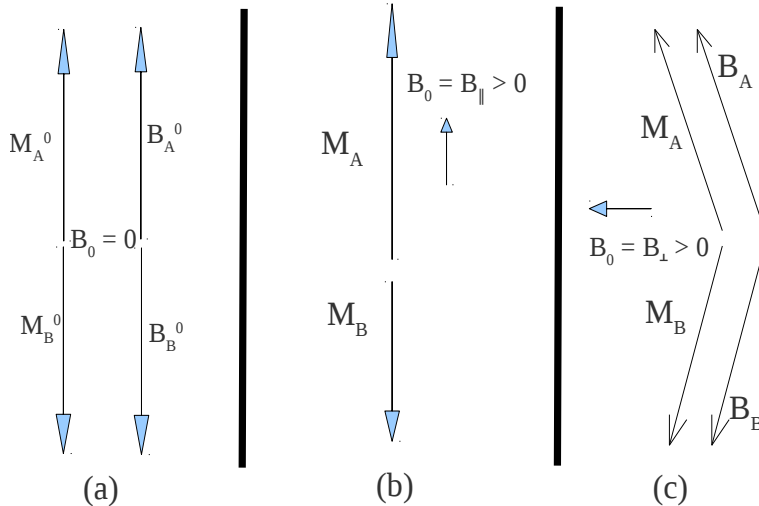
$$\vec{M}_A = \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B |\vec{B}_A| \right) \frac{\vec{B}_A}{|\vec{B}_A|} \quad \vec{M}_B \text{ analogno} \quad (6)$$

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:

$$\chi = \mu_0 \left. \frac{\partial \vec{M}}{\partial \vec{B}_0} \right|_{B_0 \rightarrow 0} \quad (7)$$

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 njeno 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 defincije 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:

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

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

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

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 $\Delta M_A + \Delta M_B$:

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

Odkoder izrazimo magnetizacijo:

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

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

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

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

1.4 Susceptibilnost nad kritično temperaturo T_c

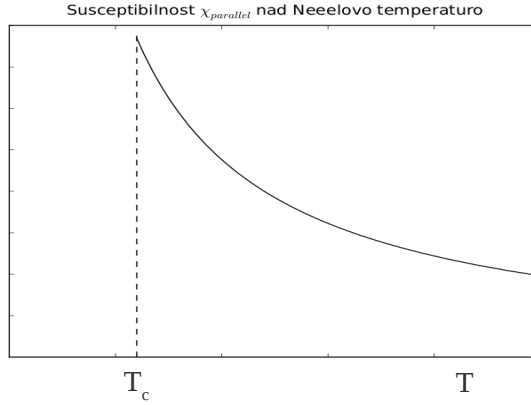
Nad kritično temperaturo spontana magnetizacija izgine. Susceptibilnost pa je definirana pri zunanem polju 0. Iz tega dvojega je očitno, da bo $B_A = B_A^0 = 0$. Magnetizacija pri odsotnem zunanem polju nad T_N je seveda enaka 0, saj ima Brillouinova funkcija pri argumentu 0 vrednost 0. Njen odvod pa 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:

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

Kjer smo definirali Néelovo temperaturo $T_N = JZj \frac{1}{k_B} \frac{j+1}{3}$. 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)

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

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 $j = 1/2$:

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

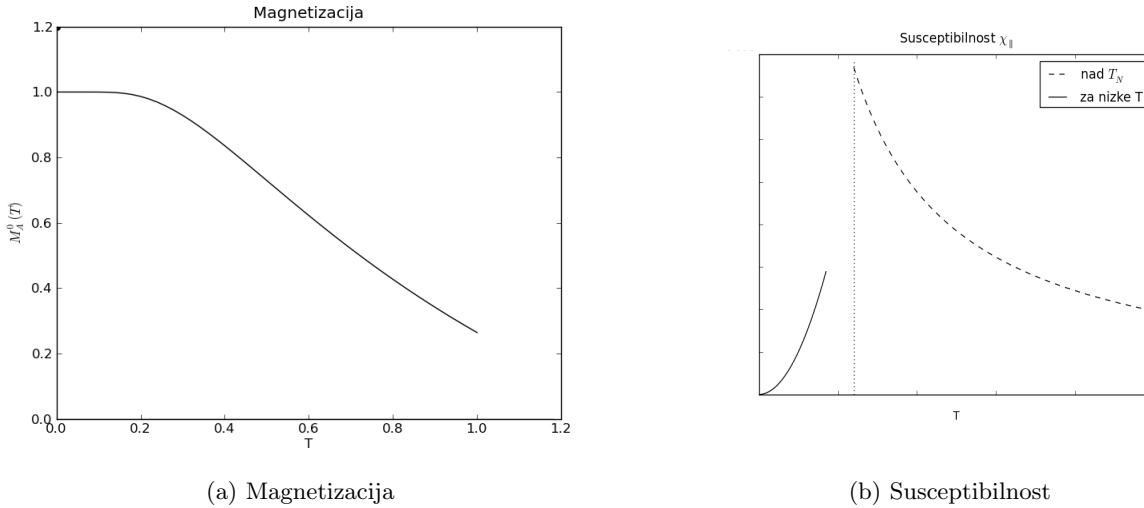
Tukaj uporabimo razvoj funkcije $\tanh(x) = 1 - 2e^{-2x}$, ko gre $x \rightarrow \infty$. Upoštevamo tudi da je $\frac{N}{2V} g \mu_B = M_A^0(T=0)$ in da je $M_A^0 = -M_B^0$. Dobimo:

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

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 imenovalc enačbe (33) in dobimo:

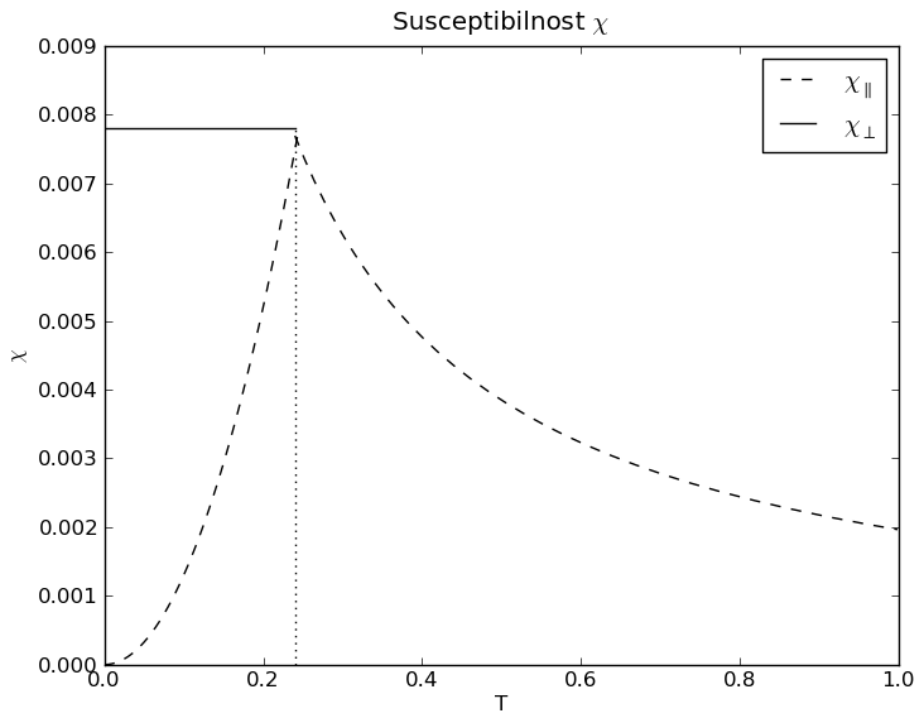
$$\vec{M} = \frac{N}{JZV} g^2 \mu_B^2 \left(2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \vec{M} \right) = \frac{2N}{JZV} g^2 \mu_B^2 B_0 - M \quad (35)$$

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

in iz tega susceptibilnost χ_{\perp} :

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

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



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