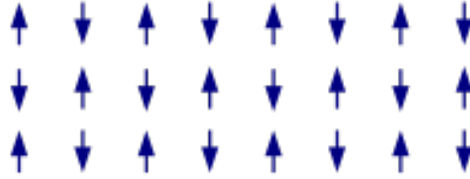


Susceptibilnost antiferomagneta pod Néelovo temperaturo

Petra Čotar

Antiferomagnet

Obravnavali bomo obnašanje susceptibilnosti antiferomagneta v okolici kritične temperature, ki ji pravimo tudi Néelova temperatura. Privzeli bomo, da obravnavamo sistem mreže atomov, ki je sestavljena iz dveh različnih vrst atomov, A in B. Ti se med seboj razlikujejo po orientaciji spinov (eni kažejo v smer z drugi pa $-z$). Velikost spina pa je na vseh atomih enaka. Hamilton našega problema je izotropni Heisenbergov model:



Slika 1: Model antiferomagnetne mreže.

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

Kot že v večih nalogah, tudi tukaj uporabimo približek povprečnega polja:

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

Zanemarimo zadnji čle, saj ne vpliva na susceptibilnost. Upoštevamo še, da ima vsak A atom natanko Z najbližjih B sosedov in obratno:

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

Označimo z N_A in N_B število atomov na mreži A ter število atomov mreži B. Tako lahko zapišemo zvezo za magnetizacijo kot:

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

Hamiltonjan pa lahko zapišemo tudi kot:

$$H = g\mu_B \sum_{i \in A} \vec{s}_i \vec{B}_A + g\mu_B \sum_{i \in B} \vec{s}_i \vec{B}_B \quad (5)$$

Upoštevali smo enačbo (4) ter vpeljali efektivna polja (B_A in B_B) za vsako od pod mrež A in B.

$$\vec{B}_A = \vec{B}_0 - \frac{JZV}{g^2\mu_B^2 N} \vec{M}_B \quad \vec{B}_B = \vec{B}_0 - \frac{JZV}{g^2\mu_B^2 N} \vec{M}_A \quad (6)$$

Tako obliko pa že poznamo od paramagneta in vemo kakšna je rešitev za magnetizacijo ($N_A = N_B$):

$$\begin{aligned} \vec{M}_A &= \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B j |\vec{B}_A| \right) \frac{\vec{B}_A}{|\vec{B}_A|} \\ \vec{M}_B &= \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B j |\vec{B}_B| \right) \frac{\vec{B}_B}{|\vec{B}_B|} \end{aligned} \quad (7)$$

kjer je B_j j-ta Brillouin-ova funkcije ter $\beta = \frac{1}{k_B T}$.

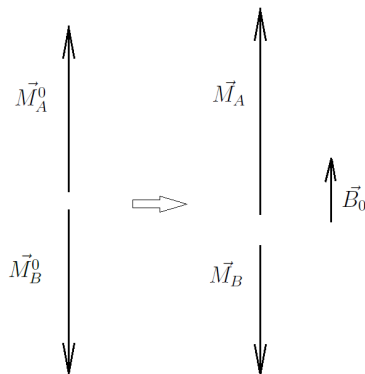
Zdaj ko imamo vse potrebne enačbe pa si pogledjmo obnašanje susceptibilnosti. V predhodnih nalogah smo že ugotovili, da je magnetizacija nenična tudi pri $\vec{B}_0 = 0$, ki ji pravimo spontana magnetizacija. V našem primeru se pojavita dve; \vec{M}_A^0 ter \vec{M}_B^0 (vsaka za eno od pod mrež atomov A in B).

$$\begin{aligned} M_A^0 &= \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B j B_A^0 \right) \\ M_B^0 &= \frac{N}{V} g\mu_B j B_j \left(\beta g\mu_B j B_B^0 \right) \end{aligned} \quad (8)$$

Ti se prav tako kot spini razlikujeta po usmerjenosti ne pa po velikosti. Zanima pa nas kakšna je magnetizacija ko dodamo magnetno polje. Pogledali si bomo dva primera; zunanje polje ki je vzporedno na spontano magnetizacijo ($B_{0\parallel}$) ter polje ki je nanj pravokotno ($B_{0\perp}$).

Vzporedno zunanje magnetno polje

Sedaj imamo še dodatno zunanje polje, ki kaže v isto smer kot spontana magnetizacija kot ena od pod mrež atomov, recimo da \vec{M}_A^0 (slika 2). Vidimo, da bo dodatno polje spremenilo le



Slika 2: Magnetizacija pri odsotnosti zunanjega polja (levo) in pri vzporednem zunanjem magnetnem polju (desno).

velikost magnetizacije, ne pa tudi smeri (eno poveča drugo pa zmanjša). Tako lahko enačbe za magnetizacijo zapišemo brez vektorjev:

$$\begin{aligned} M_A &= \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j B_A) \\ M_B &= \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j B_B) \end{aligned} \quad (9)$$

Zaradi spremembe magnetizacije, pa pride do spremembne tudi pri efektivnem polju. Ker so te majhne lahko zapišemo kot:

$$\begin{aligned} B_A &= B_A^0 + \Delta B_A \\ B_B &= B_B^0 + \Delta B_B \end{aligned} \quad (10)$$

To lahko zdaj vstavimo v enačbo (9) ter naredimo Taylorjev razvoj do prvega reda

$$M_A = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j (\beta g \mu_B j (B_A^0 + \Delta B_A)) = \frac{N}{V} g \mu_B j (B_j (\beta g \mu_B j B_A^0) + \beta g \mu_B j B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) \Delta B_A) \quad (11)$$

Tudi M_A lahko zapišemo kot $M_A = M_A^0 + \Delta M_A$. Tako z upoštevanjem enačbe (8) dobimo:

$$\begin{aligned} \Delta M_A &= \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) \Delta B_A \\ \Delta M_B &= \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_B^0) \Delta B_B \end{aligned} \quad (12)$$

kjer je izpeljva za ΔM_B enakak kot za ΔM_A .

Zdaj pa nas zanima še sprememba efektivnega polja. Tako v enačbo (6) vstavimo $M = M^0 + \Delta M$ in upoštevamo še enačbo (10):

$$B_A^0 + \Delta B_A = B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} (M_B^0 + \Delta M_B) \quad (13)$$

Pokrajšata se dela z B_A^0 in M_B^0 . Dobimo izraz za ΔB_A ter na enak način tudi ΔB_B :

$$\begin{aligned} \Delta B_A &= B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \Delta M_B \\ \Delta B_B &= B_0 - \frac{JZV}{g^2 \mu_B^2 N} \Delta M_A \end{aligned} \quad (14)$$

Zdaj pa te rezultate vstavimo nazaj v enačbo (12):

$$\begin{aligned} \Delta M_A &= \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) B_0 - JZ j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) \Delta M_B \\ \Delta M_B &= \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_B^0) B_0 - JZ j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_B^0) \Delta M_A \end{aligned} \quad (15)$$

Za izračun susceptibilnosti nas zanima celotna magnetizacija, torej $M = M_A^0 + M_B^0 + \Delta M_A + \Delta M_B$. Z upoštevanjem $M_A^0 = -M_B^0$ in $B_A^0 = -B_B^0$ lahko iz enačb (15) dobimo:

$$M = \Delta M_A + \Delta M_B = 2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) B_0 - JZ j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) M \quad (16)$$

Iz te enačbe izrazimo magnetizacijo:

$$M = \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0) B_0}{1 + JZ j^2 \beta B_j' (\beta g \mu_B j B_A^0)} \quad (17)$$

Zdaj lahko izračunamo tudi susceptibilnost:

$$\chi_{\parallel} = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B_0} = \mu_0 \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta B'_j (\beta g \mu_B j B_A^0)}{1 + JZ j^2 \beta B'_j (\beta g \mu_B j B_A^0)} \quad (18)$$

Preden nadaljujemo z izračunom susceptibilnost, si pogledjmo še kakšna je kritična temperatura tega sistema. V enačbo (8) vstavimo zvezo za B_A^0 ter tako dobimo:

$$M_A^0 = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j \left(\frac{\beta j J Z V M_A^0}{g \mu_B N} \right) \quad (19)$$

Razvijemo Brillouin-ovo funkcijo ($B_j(x) \approx \frac{j+1}{3j}x$) ter dobimo:

$$M_A^0 = \frac{N}{V} g \mu_B \frac{j+1}{3j} \frac{\beta j J Z V M_A^0}{g \mu_B N} - \dots \quad (20)$$

Kot že v preteklih nalogah, dobimo $M_A^0 = \frac{T_c}{T} M_A^0$. Kjer je T_c kritična temperatura, ki ji v tem primeru rečemo tudi Néelova temperatura:

$$T_N = \frac{JZ j(j+1)}{3k_B} \quad (21)$$

Susceptibilnost nad kritično temperaturo

Zdaj gledamo obnašanje χ_{\parallel} pri $T > T_N$, kjer ni več spontane magnetizacije, $M^0 = 0$. Lahko naredimo Taylorjev razvoj Brillouin-ove funkcije oz. njenega odvoda $B'_j(x) \approx \frac{j+1}{3j}$. To uporabimo v enačbi (18):

$$\chi_{\parallel}^> = \mu_0 \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \beta j \frac{j+1}{3}}{1 + JZ \beta j \frac{j+1}{3}} = \mu_0 \frac{2 \frac{N}{V} g^2 \mu_B^2 j^2 \frac{1}{k_B} j \frac{j+1}{3}}{T + \frac{JZ j(j+1)}{3k_B}} = \frac{C}{T + T_N} \quad (22)$$

Susceptibilnost tik pod kritično temperaturo

Poglejmo še obnašanje χ_{\parallel} pri $T < T_N$. Še vedno gledamo le za temperature blizu T_N saj tam še lahko razvijemo funkcijo:

$$B_j(x) \approx \frac{j+1}{3j}x - \lambda x^3 \quad B'_j(x) \approx \frac{j+1}{3j} - 3\lambda x^2 \quad (23)$$

To uporabimo v enačbi za magnetizacijo (19). Za izračun odvoda potrebujemo faktor λx^2 , zato zapišemo magnetizacijo malo drugače (en x zapišemo eksplicitno):

$$M_A^0 = \frac{T_N}{T} M_A^0 - \frac{N}{V} g \mu_B j \lambda x x^2 = \frac{T_N}{T} M_A^0 - \frac{N}{V} g \mu_B j \lambda \left(\frac{\beta j J Z V}{g \mu_B N} M_A^0 \right) x^2 \quad (24)$$

iz tega pa sledi:

$$1 = \frac{T_N}{T} + j^2 \beta J Z \lambda x^2$$

$$\lambda x^2 = \frac{\frac{T_N}{T} - 1}{j^2 \beta J Z} \quad (25)$$

S pomočjo tega izraza lahko zdaj $B'_j(x)$ zapišemo nekoliko drugače:

$$B'_j(x) \approx \frac{j+1}{3j} - 3 \frac{\frac{T_N}{T} - 1}{j^2 \beta J Z} = \frac{j(j+1)}{3j} \left(1 - \frac{3(T_N - T)}{T_N} \right) \quad (26)$$

Sedaj pa to vstavimo v enačbo (18) in dobimo iskano susceptibilnost:

$$\chi_{\parallel}^{\leftarrow} = \frac{C \left(1 - \frac{3(T_N - T)}{T_N} \right)}{T + T_N \left(1 - \frac{3(T_N - T)}{T_N} \right)} \quad (27)$$

Primerjava susceptibilnosti

Obe susceptibilnosti bi radi zapisali v obliki $\chi(T) = \chi(T_N) + \dots$. Zato v enačbi (22) in (27) vstavimo $T = T_N + (T - T_N)$, kjer je $T - T_N$ majhen odmik od T_N .

$$\chi_{\parallel}^{\rightarrow} = \frac{C}{T_N + (T - T_N) + T_N} = \frac{C}{2T_N \left(1 + \frac{T - T_N}{2T_N} \right)} \approx \frac{C}{2T_N} \left(1 - \frac{T - T_N}{2T_N} \right) \quad (28)$$

$$\begin{aligned} \chi_{\parallel}^{\leftarrow} &= \frac{C \left(1 - \frac{3(T_N - T)}{T_N} \right)}{T_N + (T - T_N) + T_N - 3(T_N - T)} = \\ &= \frac{C \left(1 - \frac{3(T_N - T)}{T_N} \right)}{2T_N \left(1 - \frac{4(T_N - T)}{2T_N} \right)} = \frac{C}{2T_N} \left(1 - \frac{T_N - T}{T_N} \right) \end{aligned} \quad (29)$$

Vidimo da sta pri T_N obe susceptibilnosti enaki, $\frac{C}{2T_N}$ (slika4).

Pravokotno zunanje magnetno polje

Sedaj si pogledjmo še, kaj se zgodi ko imamo zunanje magnetno polje, ki je pravokotno na spontano magnetizacijo. V tem primeru se ne spreminja le velikost posamezne magnetizacije ampak tudi njena smer (slika3). Za izračun susceptibilnosti spet potrebujemo celoten \vec{M} . Uporabimo enačbi (7):

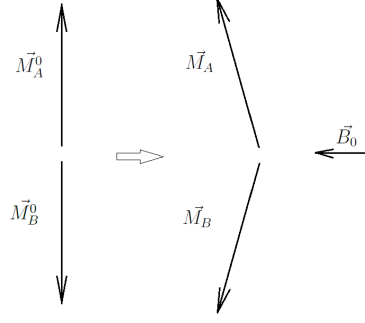
$$\vec{M} = \vec{M}_A + \vec{M}_B = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j \left(\beta g \mu_B j |\vec{B}_A| \right) \left(\frac{\vec{B}_A + \vec{B}_B}{|\vec{B}_A|} \right) \quad (30)$$

kjer smo upoštevali $|\vec{B}_A| = |\vec{B}_B|$. Z enačbama (6) lahko zapišemo:

$$\vec{B}_A + \vec{B}_B = 2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{Ng^2\mu_B^2} (\vec{M}_A + \vec{M}_B) = 2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{Ng^2\mu_B^2} \vec{M} \quad (31)$$

Za izračun susceptibilnosti potrebujemo le linearen prispevek magnetnega polja k magnetizaciji. Zato lahko naredimo naslednji približek; $|\vec{B}_A| = |\vec{B}_A^0|$. S tem pa dobimo iz enačbe (30):

$$\vec{M} = \frac{N}{V} g \mu_B j B_j \left(\beta g \mu_B j |\vec{B}_A^0| \right) \frac{1}{|\vec{B}_A^0|} \left(2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{Ng^2\mu_B^2} \vec{M} \right) \quad (32)$$



Slika 3: Magnetizacija pri odsotnosti zunanjskega polja (levo) in pri pravokotnem zunanjem magnetnem polju (desno).

V prvem delu enačbe prepoznamo \vec{M}_A^0 . Spomnimo se še zveze:

$$\vec{B}_A^0 = \frac{JZV}{Ng^2\mu_B^2} \vec{M}_A^0 \quad \longrightarrow \quad \frac{\vec{M}_A^0}{\vec{B}_A^0} = \frac{Ng^2\mu_B^2}{JZV} \quad (33)$$

Sedaj lahko to vstavimo v enačbo (32):

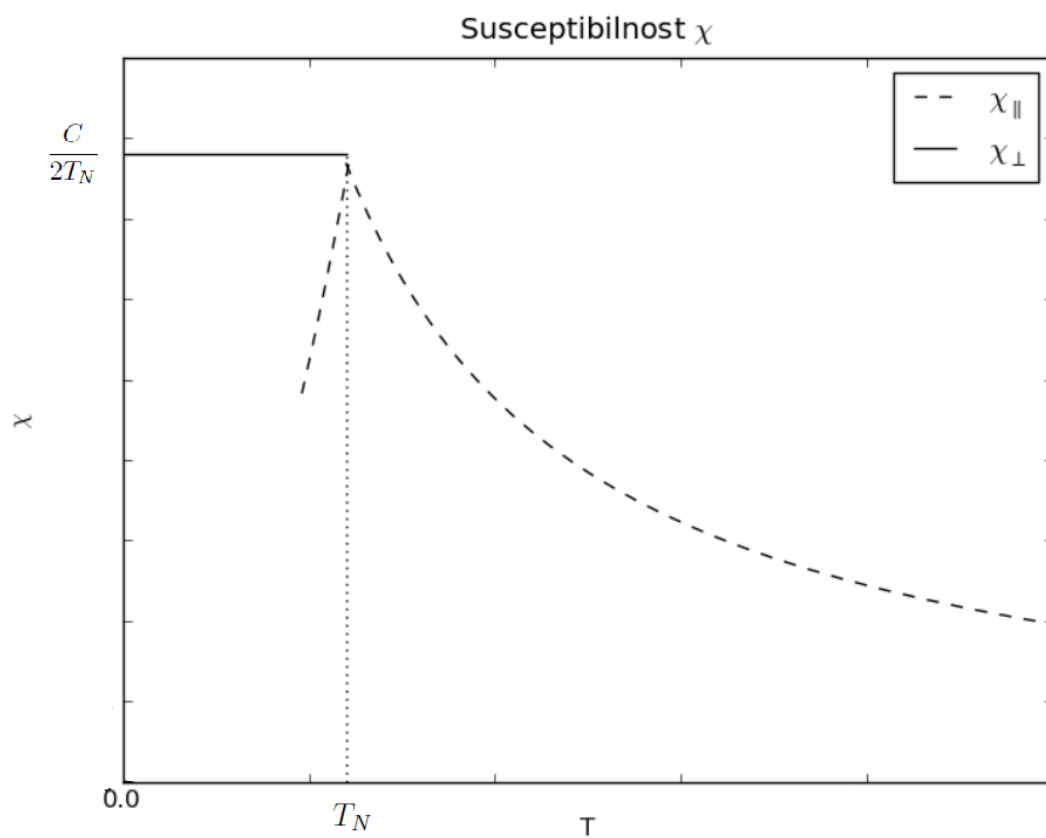
$$\vec{M} = \frac{\vec{M}_A^0}{\vec{B}_A^0} \left(2\vec{B}_0 - \frac{JZV}{Ng^2\mu_B^2} \vec{M} \right) = \frac{2N}{JZV} g^2 \mu_B^2 \vec{B}_0 - \vec{M} \quad (34)$$

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

Iz tega pa ni težko izračunati še susceptibilnost:

$$\chi_{\perp} = \mu_0 \frac{N}{JZV} g^2 \mu_B^2 = \frac{C}{2T_N} \quad (36)$$

Vidimo, da je susceptibilnost konstantna in enaka vrednosti χ_{\parallel} pri T_N .



Slika 4: Susceptibilnost v odvisnosti od temperature.