Ginzburg-Landauova teorija domenske stene

Naloga pri predmetu Fizika kondenzirane snovi

Jaka Pišljar, FMF

18. 12. 2014

Izpeljati želimo diferencialno enačbo, ki določa obnašanje **magnetizacije** $M(\mathbf{r})$ v domenski steni feromagneta v bližini temperature faznega prehoda T_c

$$-\tilde{A}\nabla^2 M(\mathbf{r}) + 2AM(\mathbf{r}) + 4BM^3(\mathbf{r}) = 0 \tag{1}$$

iz **mikroskopske slike** problema. Velja še $\tilde{A} > 0$, $B > 0$ in $A \propto (T - T_c)$, kar so konstante, ki jih želimo pravzaprav določiti.

Opomba: Gornji izraz (1) smo dobili iz minimizacije *Ginzburg-Landauovega* izraza za prosto energijo domenske stene

$$F = \int \mathrm{d}^3\mathbf{r} \left[\frac{\tilde{A}}{2}(\nabla M)^2 + AM^2(\mathbf{r}) + BM^4(\mathbf{r}) \right] = \int f(\mathbf{r})\mathrm{d}^3\mathbf{r}, \tag{2}$$

tako, da zahtevamo $F = min.$ oziroma variacija

$$\frac{\delta F}{\delta M} = 0,$$

kar vodi do Euler-Lagrangeve enačbe

$$\frac{\partial f}{\partial M} - \nabla \frac{\partial f}{\partial(\nabla M)} = 0.$$

Obravnavamo model domenske stene **feromagneta** ($J > 0$) v okviru **Isingovega modela**, ki sklaplja zgolj z komponente spinov. Omejimo se na **eno dimenzijo** in na spine z velikostjo $s = 1/2 \to s^z = \pm 1/2$. Hamiltionijan takega sistema potem zapišemo kot

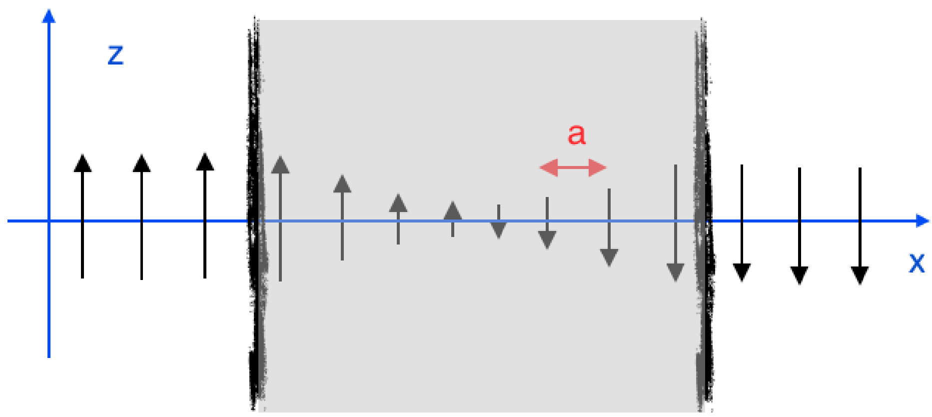
$$H = -J \sum_i s_i^z s_{i+1}^z, \tag{3}$$

kjer teče vsota po vseh spinih v 1D verigi. Uporabimo **približek povprečnega polja**, kot smo ga že v nekaterih prejšnjih nalogah, s transformacijo

$$s_i^z s_{i+1}^z \to \langle s_i^z \rangle s_{i+1} + s_i^z \langle s_{i+1} \rangle + \langle s_i^z \rangle \langle s_{i+1} \rangle .$$

Zadnjega člena ne upoštevamo in zapišemo novi Hamiltonijan kot dve vsoti

$$H = -J \left(\sum_i \langle s_i^z \rangle s_{i+1} + \sum_i s_i^z \langle s_{i+1} \rangle \right).$$



Slika 1: *Domenska stena, kot si jo predstavljamo v tem problemu.*

V prvi vsoti preimenujemo indeks $i+1 \to i$, da lahko celoten H zapišemo kot eno vsoto

$$H = -J \sum_i s_i^z \left(\langle s_{i-1}^z \rangle + \langle s_{i+1} \rangle \right). \tag{4}$$

Sedaj lahko vpeljemo povprečno polje B_i^{ef} na mestu i kot

$$B_i^{ef} = -\frac{J}{g\mu_B} \left(\langle s_{i-1}^z \rangle + \langle s_{i+1} \rangle \right),$$

da se H zapiše kot ponavadi

$$H = g\mu_B \sum_i B_i^{ef} s_i^z. \tag{5}$$

Račun bomo izvedli brez da bi vpeljali magnetizacijo M^z, to bomo storili na koncu. Na ta način bo račun malenkost preglednejši.

Projekcija spina na z os se znotraj domenske stene z indeksom i spreminja, kot prikazuje Slika 1. Indeks i teče vzdolž koordinate x in če so spini dovolj skupaj in razlike med s_i in s_{i+1} dovolj majhne, se povprečne vrednosti spinov vzdolž verige počasi (zvezno) spreminjajo in jih lahko **nadomestimo z zveznimi spremenljivkami** kot

$$\begin{aligned}
\langle s_i^z \rangle &= s^z(x) \\
\langle s_{i+1}^z \rangle &= s^z(x+a) \\
\langle s_{i-1}^z \rangle &= s^z(x-a),
\end{aligned}$$

kjer je a razdalja med zaporednima spinoma v verigi. Kot rečeno, se pričakovana vrednost spina počasi spreminja, zato lahko $s^z(x \pm a)$ s Taylorjevim razvojem izrazimo s $s^z(x)$

$$s^z(x \pm a) = s^z(x) \pm a\frac{\partial s_z(x)}{\partial x} + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 s^z(x)}{\partial x^2},$$

kjer je potreben razvoj do drugega reda, saj se prvi red pokrajša, ko izraza vstavimo v izraz za efektivno polje. Transformacijo in razvoj torej nesemo v izraz za efektivno polje, ki postane sedaj zvezna količina $B_i^{ef} \to B^{ef}(x)$ in dobimo

$$B^{ef} = -\frac{2J}{g\mu_B}\left[s^z(x) + \frac{a^2}{2}\frac{\partial^2 s^z(x)}{\partial x^2} \right].$$

Vemo, da lahko v približku povprečnega polja pričakovano vrednost spina izrazimo z Brillouinovo funkcijo, v primeru polovičnega spina pa je ta še posebej enostavna in sicer je v našem zveznem kar

$$s^z(x) = -\frac{1}{2}\tanh\left(\frac{1}{2}\beta g\mu_B B^{ef}(x)\right). \tag{6}$$

Enačbe v splošnem ne znamo rešiti, lahko pa uporabimo približek, ki velja v bližini kritične temperature torej ko velja $(T - T_c)/T_c \ll 1$. Takrat je argument Brillouinove funkcije u majhen, saj je efektivno polje sosedov takrat majhno in lahko uporabimo njen razvoj okoli ničle do drugega reda

$$\tanh(u) = u - u^3/3 + ...$$

Iz (6) potem dobimo

$$s^z(x) = -\frac{1}{2}\left\{\frac{1}{2}\beta g\mu_B\left[-\frac{2J}{g\mu_B}\left(s^z(x) + \frac{a^2}{2}\nabla^2 s^z(x)\right)\right] - \frac{1}{24}(\beta g\mu_B)^3\left[-8\frac{J^3}{(g\mu_B)^3}\left(s^z(x) + \frac{a^2}{2}\nabla^2 s^z(x)\right)^3\right]\right\},$$

kjer smo namesto parcialnih odvodov po x zaradi preglednosti zapisali raje ∇^2.

Sedaj uporabimo še en približek, za katerega ni takoj očitno, da ga lahko uporabimo, vendar lahko po končanem računu pokažemo, da so **prispevki zanemarjenih členov majhni** in smo jih upravičeno zanemarili. V zadnjem oklepaju

$$\left(s^z(x) + \frac{a^2}{2}\nabla^2 s^z(x)\right)^3 = (s^z(x)^3 + ...) \approx s^z(x)^3,$$

obdržimo zgolj zapisani člen ostale (mešane člene/višje potence odvodov) pa zanemarimo! Na ta način močno poenostavimo enačbo ter po nekaj računanja dobimo rezultat

$$\left(\frac{1}{2}\beta J - 1\right)s^z(x) + \frac{1}{4}\beta J a^2\nabla^2 s^z(x) - \frac{1}{3}\beta^3 J^3 s^z(x)^3 = 0$$

. Izraz malo preoblikujemo – iz prvega oklepaja izpostavimo β in k_B, da dobimo

$$\beta k_B\left(\frac{1}{2}\frac{J}{k_B} - T\right)s^z(x) + \frac{1}{4}\beta J a^2\nabla^2 s^z(x) - \frac{1}{3}\beta^3 J^3 s^z(x)^3 = 0.$$

V vsakem členu se en β pokrajša, uvedemo lahko **kritično temperaturo** $T_c = J/2k_B$ in dobimo končni izraz

$$\frac{1}{4}Ja^2\nabla^2 s^z(x) + k_B(T_c - T)s^z(x) - \frac{1}{3}\beta^2 J^3 s^z(x)^3 = 0. \tag{7}$$

Šele sedaj lahko uvedemo magnetizacijo $M(x) = M^z(x)$, da se približamo *Ginzburg-Landauovi* teoriji domenske stene in sicer v eni dimenziji definiramo magnetizacijo kot

$$M_i = -\frac{N}{L}g\mu_B\langle s_i^z\rangle \quad \rightarrow \quad M(x) = -\frac{N}{L}g\mu_B s^z(x),$$

kjer je $L = Na$ dolžina verige, oziroma velikost kristala. V konstanti nastopa zgolj razmerje $L/N = a$. Izrazimo $s^z(x)$ z magnetizacijo in nesemo v (7) ter dobimo končni rezultat prvega dela naloge

$$-\frac{1}{4}Ja^2\nabla^2 M(x) + k_B(T - T_c)M(x) + \frac{1}{3}\beta^2 J^3\frac{L^2}{N^2 g^2\mu_B^2}M^3(x) = 0, \tag{8}$$

od koder lahko preberemo konstante $\tilde{A}$, A in B nastopajoče v začetnem izrazu.

Sedaj se lotimo drugega dela naloge, kjer se ukvarjamo zgolj z izvornima izrazoma (1) in (2). Zanima nas, kakšna funkcija koordinate x je magnetizacija znotraj domenske stene. Prvo kar opazimo je, da lahko enačbo (1) vzdolž osi x zapišemo v obliki

$$\frac{\partial^2 M(x)}{\partial x^2} = \frac{\partial V(M)}{\partial M},$$

kjer je $V(M) = AM^2 + BM^4$, torej v nekakšni obliki 2. Newtonovega zakona, če si mislimo, da je M koordinata, x pa čas. Potem je ta enačba ekvivalentna tisti, ki opisuje gibanje klasičnega delca v potencialu $-V(M)$. Ker nobena stran enačbe ni eksplicitno odvisna od x lahko pokažemo, da se spodnji izraz v [...] (analog Lagrangeevi funkciji $\mathcal{L} = T - V$) ohranja vzdolž x (s časom):

$$\begin{aligned}\frac{\partial}{\partial x}\left[\frac{\tilde{A}}{2}\left(\frac{\partial M}{\partial x}\right)^2 - AM^2 - BM^4\right] &= \tilde{A}\frac{\partial M}{\partial x}\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - 2AM\frac{\partial M}{\partial x} - 4BM^3\frac{\partial M}{\partial x} = \\ &= \frac{\partial M}{\partial x}\left(\tilde{A}\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} - 2AM - 4BM^3\right) = 0,\end{aligned}$$

kjer smo v zadnjem koraku upoštevali diferencialno enačbo (1) zapisano zgolj za x smer. Velja torej, da je

$$\frac{\tilde{A}}{2}\left(\frac{\partial M}{\partial x}\right)^2 - AM^2 - BM^4 = C,$$

kjer je konstanta C neodvisna od x.

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* $\tilde{M} = M/M_0$ ter *brezdimenzijsko koordinato* $\tilde{x} = x/\xi$. S temi spremembami prevedemo zgornjo enačbo na brezdimenzijsko kot

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \tilde{M}}{\partial \tilde{x}}\right)^2 + \frac{1}{2}\tilde{M}^2 - \frac{1}{4}\tilde{M}^4 = C'. \tag{9}$$

Novo konstanto C' lahko določimo iz **asimptotskih vrednosti magnetizacije**, saj velja

$$\begin{aligned}&\lim_{x\to\pm\infty}\frac{\partial \tilde{M}}{\partial \tilde{x}} = 0\\ &\lim_{x\to\pm\infty}\tilde{M}^2 = 1 \quad \to \quad \lim_{x\to\pm\infty}\tilde{M}^4 = 1\end{aligned}$$

iz česar dobimo

$$C' = \frac{1}{4}.$$

Enačbo (9) lahko sedaj zapišemo drugače kot

$$\frac{1}{2}\left(\frac{\partial \tilde{M}}{\partial \tilde{x}}\right)^2 = \left(\frac{1}{2} - \frac{\tilde{M}^2}{2}\right)^2$$

in jo korenimo

$$\frac{\partial \tilde{M}}{\partial \tilde{x}} = \pm\frac{1}{\sqrt{2}}\left(1 - \tilde{M}^2\right)$$

Sedaj se odločimo, da se bo magnetizacija v domenski steni bodisi zgolj povečevala ali zmanjševala: izberemo, da je odvod zgolj enoznačen denimo pozitiven. Spremenljivke ločimo in izraz integriramo

$$\int_0^{\tilde{M}(x)} \frac{\mathrm{d}\tilde{M}}{1 - \tilde{M}^2} = \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{\tilde{x}_0}^{\tilde{x}} \mathrm{d}\tilde{x},$$

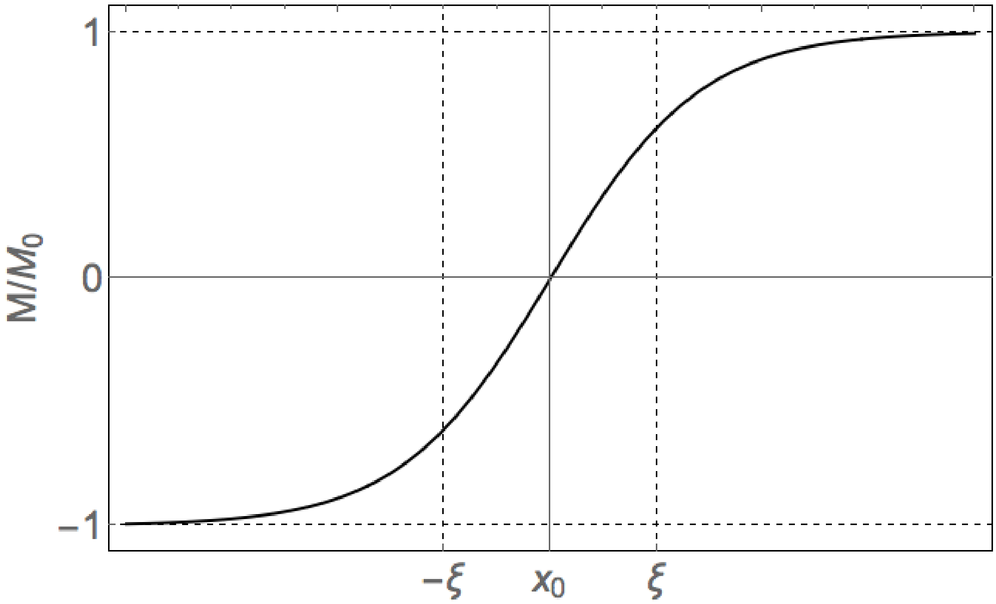
kjer je $\tilde{x}_0$ mesto na osi $\tilde{x}$ kjer velja $M(\tilde{x_0}) = 0$. Po integraciji dobimo, da je

$$\operatorname{arctanh}(\tilde{M}(\tilde{x})) = \frac{1}{\sqrt{2}}(\tilde{x} - \tilde{x}_0).$$

Ko vstavimo nazaj dimenzijske količine dobimo rezultat za magnetizacijo

$$M(x) = M_0 \tanh\left(\frac{x - x_0}{\sqrt{2}\xi}\right),$$

kar je prikazano tudi na Sliki 2. Spomnimo se konstant, izpeljanih v prvem delu:



Slika 2: *Magnetizacija vzdolž koordinate x, pravokotne na domensko steno*

$$\tilde{A} = \frac{1}{4} J a^2$$
$$A = \frac{1}{2} k_B (T - T_c)$$
$$B = \frac{L^2}{12 N^2 g^2 \mu_B^2} \beta^2 J^3$$

Korelacijska dolžina ξ nam očitno predstavlja efektivno širino domenske stene. Ko gremo proti kritični temperaturi T_c, začne širina stene divergirati kot

$$\xi = \sqrt{-\frac{\tilde{A}}{2A}} = \sqrt{-\frac{J a^2}{4 k_B (T - T_c)}} \propto \sqrt{\frac{1}{T_c - T}},$$

kjer smo konstante prebrali iz prvega dela naloge. Domenske stene so dobro definirane (tanke) pri nizkih temperaturah, v bližini T_c pa se razširijo in so slabše definirane.

Oglejmo si še asimptotsko vrednost magnetizacije M_0

$$M_0 = \sqrt{-\frac{A}{2B}} = \sqrt{3 k_B (T_c - T)/2} \frac{N}{L} \frac{g \mu_B}{\beta J^{3/2}} \propto \sqrt{(T_c - T)},$$

ki je v najnižjem redu temperature T sorazmerna njenemu korenu.