Fizika kondenzirane snovi

Mikroskopska teorija domenske stene in povezava s teorijo Landau-a

Martin Ulaga

V nalogi najprej rešim problem domenske stene v grobi poenostavitvi Heisenbergovega modela spinskega sistema in pokažem, kako domenska stena postane energijsko udobna z vnosom anizotropije v model. Izračunam tudi tipično skalo za dimenzijo domenske stene. Nato v anizotropnem Isingovem modelu poiščem obliko domenske stene v približku povprečnega polja. V tem modelu se da pokazati, kakšna teorija Landau-a ustreza sistemu s primerjavo koeficientov te makroskopske teorije s tistimi, ki jih izpeljemo iz mikroskopske slike.

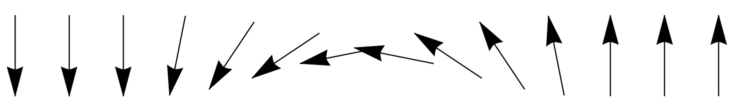
1 Domenska stena v Heisenbergovem modelu

1D spinsko verigo (slika 1) opišemo s izotropnim Heisenbergovim Hamiltonjanom

$$H_{Heis} = -J \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1}, \tag{1}$$

kjer so $\vec{S}_i$ kvantnomehanski operatorji spina, katerih pravo naravo takoj na začetku grobo zanemarimo in izraz obravnavamo kot navaden skalarni produkt dveh klasičnih vektorjev. V tej sliki je Hamiltonova funkcija konstanta gibanja in ustreza energiji sistema, če je od časa odvisna samo posredno. Privzamemo, da so vsi spini enako veliki.

$$E = -J \sum_i S_i\, S_{i+1}\, \cos\varphi_{i,i+1} = -JS^2 \sum_i \cos\varphi_{i,i+1} \tag{2}$$



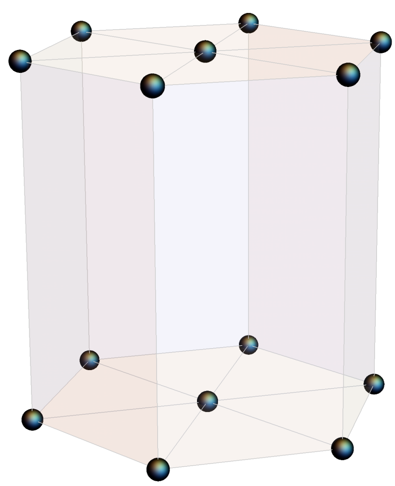
Slika 1: Domenska stena 1D spinske verige.

Če je domenska stena razmeroma velika, se kot $\varphi_{i,i+1}$ med sosedi spreminja počasi in je med vsemi spini približno enak. Lahko torej razvijemo

$$
\begin{aligned}
E &= -JS^2 N \cos\left(\frac{\pi}{N}\right) \approx -JS^2 N \left[1 - \frac{1}{2}\left(\frac{\pi}{N}\right)^2\right] \\
&= -JS^2 N + \frac{JS^2\pi^2}{2}\,\frac{1}{N} \\
&\equiv E_0 + E_{stene}.
\end{aligned} \tag{3}
$$

Energija kristala E_0 je kot pričakovano negativna, energija stene pa je v tem rezultatu pozitivna. Iz minimizacije energije stene po N se zdi, da je sploh ne bi smelo biti. Boljši model upošteva anizotropnost v kristalni mreži z dodatkom t.i. anizotropne energije. To vpeljemo kot analitično funkcijo kotov, tj. orientacije spina, in je odvisna od mrežnih razdalj. Za primer lahko vzamemo heksagonalno mrežo: ravnine trikotnih Bravaisovih mrež. Razdalje med spini v ravninah so manjše od razdalj med ravninami, torej je interakcija med ravninami manj pomembna od interakcij znotraj ravnine. Normala na ravnino je torej preferenčna smer za ureditev sistema, kar opišemo v najnižjem redu z izrazom za aniz. energijo

$$
E = K_1' \sin^2\theta. \tag{4}
$$



Slika 2: *Simple hexagonal* mreža. Vir: Mathematica.

K_1' je snovna konstanta, θ pa je merjen stran od ravnine. K anizotropni energiji prispevajo vsi spini, ki so odklonjeni od preferenčne smeri, torej spini v domenski steni. V računu upoštevamo predpostavke, da je domenska stena velika in da so vsi koti med sosedi približno enaki, torej $\theta_i \approx i\pi/N$ (celotni zasuk po N spinih je π).

$$
\begin{aligned}
E_{stene}^{(aniz.)} &= \sum_i K_1' \sin^2 \theta_i \\
&\approx K_1' \int_0^N \sin^2 \frac{i\pi}{N} \,\mathrm{d}i, \quad u = \frac{i\pi}{N} \\
&= K_1' \frac{N}{\pi} \int_0^\pi \sin^2 u \,\mathrm{d}u \\
&= K_1' \frac{N}{\pi} \frac{\pi}{2} = K_1' \frac{N}{2}
\end{aligned}
\tag{5}
$$

Energija domenske stene je torej

$$
E_{stene} = \frac{1}{2} J S^2 \pi^2 \frac{1}{N} + \frac{K_1'}{2} N \tag{6}
$$

in zahteva po minimizaciji $\mathrm{d}E/\mathrm{d}N = 0$ vodi do enačbe

$$
\begin{aligned}
&\frac{K_1'}{2} - \frac{1}{2} J S^2 \pi^2 \frac{1}{N^2} = 0 \\
\rightarrow &N = \sqrt{\frac{K_1'}{J S^2 \pi^2}} \sim 100 \text{ za večino snovi.}
\end{aligned}
\tag{7}
$$

Zadnja vrstica torej tudi opravičuje predpostavko, da je domenska stena razmeroma velika.

2 Domenska stena v približku povprečnega polja

Obravnavamo 1D spinsko verigo, kot v prejšnji točki. Kot videno, mora v kristalu obstajati priviligirana smer, zato mora model vsebovati anizotropijo. Tak je Isingov model, ki mu pripada Hamiltonjan

$$
H_{Ising} = -J \sum_i s_i^z \, s_i^{z+1}. \tag{8}
$$

Tu so sklopljene samo z-komponente spinov. Zaradi enostavnosti vzamemo $s = 1/2$. Ta izbira spina bo postala jasna nekoliko kasneje. Privzeli smo sklopitev samo med najbližjimi sosedi in lahko v odsotnosti zunanjega polja zapišemo efektivno polje na i-tem mestu

$$B_i^{eff} = -\frac{J}{g\mu_B}\left(\left\langle s_{i-1}^z\right\rangle + \left\langle s_{i+1}^z\right\rangle\right), \tag{9}$$

kjer $\langle\cdot\rangle$ označuje pričakovano vrednost količine, kot je to običajno pri MFA. V naslednjem koraku si mislimo, da je količina $\langle s^z\rangle$ zvezna po x in da se spreminja počasi (označimo s $s(x)$). To je enaka predpostavka, kot v prejšnji točki. Potem obstaja Taylorjeva vrsta $s(x \pm a) = \exp(\pm aD)s(x)$, ki jo tu odrežemo po treh členih. Efektivno polje je potem

$$\begin{aligned}
B_x^{eff}(x) &= -\frac{J}{g\mu_B}\left(e^{-aD}s(x) + e^{aD}s(x)\right) \\
&\approx -\frac{J}{g\mu_B}\left(s(x) - as'(x) + \frac{1}{2}a^2s''(x) + s(x) + as'(x) + \frac{1}{2}a^2s''(x)\right) \\
&= -\frac{2J}{g\mu_B}\left(s(x) + \frac{1}{2}s''(x)\right).
\end{aligned} \tag{10}$$

Količina a je seveda mrežna razdalja. Ta rezultat bomo uporabili v Brillouinovem rezultatu za pričakovano vrednosti $s(x)$. Hamiltonjan v MFA postane

$$H_{MFA} = g\mu_B \sum_i s_i^z\, B^{eff}(x_i) \tag{11}$$

z rešitvijo

$$s(x) = -jB_j\left(\beta j g\mu_B B^{eff}(x)\right), \tag{12}$$

kjer j označuje velikost spina, B_j je Brillouinova funkcija in $\beta = (k_BT)^{-1}$. Omejimo se na $j = 1/2$, ker se za ta primer da Brillouinovo funkcijo enostavneje izraziti z elementarnimi funkcijami in je zato razvoj za temperature malo pod kritično temperaturo enostavnejši. Treba se je spomniti izraza za dvojni kot hiperboličnih funkcij, preostanek pa je puščen bralcu za vajo. Navajam samo rezultat.

$$s(x) = -\frac{1}{2}\tanh\left(\frac{\beta}{2}g\mu_B B^{eff}(x)\right) \tag{13}$$

Funkcija tanh ima za majhne argumente vrsto

$$\tanh(x) \approx x - \frac{x^3}{3}. \tag{14}$$

Če naredimo ta razvoj in upoštevamo še izraz za efektivno polje, dobimo enačbo

$$\begin{aligned} s(x) \approx -\frac{1}{2}\Bigg\{ &\left[\frac{\beta}{2} g\mu_B(-)\frac{2J}{g\mu_B}\left(s(x)+\frac{1}{2}a^2 s''(x)\right)\right] \\ &- \frac{1}{3}\left[-\beta J\left(s(x)+\frac{1}{2}a^2 s''(x)\right)\right]^3\Bigg\}. \end{aligned} \tag{15}$$

V drugem delu izraza so že pokrajšane nekatere konstante in števílski faktorji. Potrebno je še komentirati kub binoma. Kot je bilo že omenjeno, privzemamo da se $s(x)$ počasi spreminja skozi domeno, zato lahko pričakujemo, da bodo členi tipa $s^p(s'')^q$ majhni. V resnici gre tu za količine, ki so reda $p+2q$, ker je drugi odvod drugega reda (v nekem smislu je to pritisnjena parabola). V tem smislu je že prva zanemarjena količina, $s^2 s''$, četrtega reda[1].

$$s(x) = \frac{\beta J}{2} s(x) + \frac{\beta J}{4} a^2 s''(x) - \frac{(\beta J)^3}{3} s^3(x) \tag{16}$$

Od enačbe odštejemo $s(x)$ in delimo z β. Preostali β pišemo kot $k_B T$, upoštevamo tudi, da je kritična temperatura sistema $J/2k_B$. Tako dobimo enačbo domenske stene. Rešitev lahko komentiramo po tem, ko omenimo makroskopsko teorijo.

$$k_B(T_C - T)\, s(x) + \frac{J}{4} a^2 s''(x) - \frac{J}{3}\,(\beta J)^2\, s^3(x) = 0 \tag{17}$$

3 Povezava z makroskopsko teorijo

Teorija Landau-a opisuje fazne prehode drugega reda s koncepti proste energije kot analitične funkcije ureditvenega parametra, ki je za magnetne sisteme navadno magnetizacija. Analitične funkcije imajo Taylorjevo vrsto; zapišemo jo kot

$$F = F_0 + \int \left[\alpha M + \frac{1}{2} A M^2 + \frac{1}{4} B M^4 + \ldots\right] \mathrm{d}^3\mathbf{r}. \tag{18}$$

Navadno se zahteva, da je linearni člen enak 0 in da je prosta energija soda funkcija. V prisotnosti zunanjega polja bi lahko dodali še člene oblike $-\mathbf{M}\cdot\mathbf{H}$, v problemu domenske stene pa privzamemo, da je energija skrita tudi v domenski steni in zato uganemo dodatni člen $\frac{1}{2}\tilde{A}\,(\nabla M)^2$. Minimizacija proste energije

[1] Na koncu "se izkaže", da so že količine do tretjega reda povsem ustrezne in je rezultat konsistenten s predpostavkami.

je ekvivalentna zahtevi $\delta F = 0$ (funkcionalni odvod). V funkcionalu nastopa magnetizacija kot koordinata in $\mathbf{r}$, torej prostor, kot parameter[2].

$$\frac{\partial f}{\partial M} - \nabla \frac{\partial f}{\partial (\nabla M)} = 0 \tag{19}$$

Mali f označuje gostoto proste energije, tj. izraz v integralu. Z oznakami od zgoraj:

$$AM - \tilde{A}\nabla^2 M + BM^3 = 0 \tag{20}$$

To je v resnici ista enačba, kot enačba 17 in lahko s primerjavo preberemo točne vrednosti koeficientorv A, $\tilde{A}$ in B[3]

$$\begin{aligned} A &= -\frac{k_B}{2}(T_C - T) \\ \tilde{A} &= \frac{Ja^2}{4} \\ B &= \frac{1}{12}(\beta J)^3 \left(\frac{a}{g\mu_B}\right)^2 \end{aligned} \tag{21}$$

To je konsistentno z vsemi ključnimi ugotovitvami iz teorije Landau-a: B mora biti pozitiven, sicer se zahteva po minimizaciji v situaciji z neskončno magnetizacijo; A mora pri T_C spremeniti predznak v $(-)$; $\tilde{A}$ pa mora biti pozitiven, sicer je energijsko ugodna divje oscilirajoča magnetizacija. Situacija, da je mogoče iz mikroskopske slike izpeljati teorijo Landau-a, je razmeroma redka.

4 Oblika domenske stene

Enačbo 20 prepišemo z upoštevanjem enodimenzionalne situacije v obliko[4]

$$\tilde{A}\,\frac{\partial^2 M}{\partial x^2} = \frac{\partial}{\partial M}\left(AM^2 + BM^4\right). \tag{22}$$

V skladu s prej obrazloženo predstavo o magnetizaciji kot koordinati in prostoru kot parametru si gornjo enačbo interpratiramo kot neke vrste Newtonov zakon: odvod krajevno odvisnega "potenciala" je proporcionalen "pospešku". Spet v definiciji potenciala na žalost nastopa $(-)$, zato

[2] To je v resnici konsistentno z Lagrangianom elektromagnetnega polja, kot se ga izpelje pri istoimenskem predmetu, le da tu ne stopimo na raven potencialov.

[3] Pozor: magnetizacija je definirana kot $M = -ng\mu_B \langle s \rangle$.

[4] Tu sta A in B definirana z malenkost drugačnimi številskimi predfaktorji iz "zgodovinskih razlogov".

$$\text{“sila”} = -\nabla V = -\partial_M \left(AM^2 + BM^4 \right). \tag{23}$$

Račun je tako ekvivalenten problemu iz klasične mehanike, od koder lahko črpamo navdih za naslednji trik: v klasični mehaniki pogosto namesto Newtonove enačbe rešujemo ekvivalentne Hamiltonove enačbe. Tu se niti ni treba spustiti vanje, lahko le opazimo, da mora biti Hamiltonova funkcija konstanta gibanja, ker ni neposredno odvisna od parametrov, tj. “koordinate” x[5].

$$\begin{aligned} H &= T + V = konst. \\ T &= \frac{\tilde{A}}{2} \left(\frac{\partial M}{\partial x} \right)^2 \\ V &= -AM^2 - BM^4 \end{aligned} \tag{24}$$

S primerno izbiro brezdimenzijskih enot je to ekvivalentno enačbi

$$\begin{aligned} c &= \frac{1}{2} \left(\frac{\partial m}{\partial s} \right)^2 + \frac{1}{2} m^2 - \frac{1}{4} m^4 \\ m &= M/M_0 = \sqrt{-\frac{2B}{A}} \\ s &= x/\xi = \sqrt{-\frac{2A}{\tilde{A}}}. \end{aligned} \tag{25}$$

Če pogledamo to enačbo daleč stran od domenske stene, je reducirana magnetizacija povsod enaka 1 in se ne spreminja več s krajem. Torej

$$c = 0 + \frac{1}{2} - \frac{1}{4} = \frac{1}{4}. \tag{26}$$

Enačbo lahko zapišemo v lepši obliki: na eno stran damo vse člene z m^p, na drugo pa odvode.

$$\left(\frac{1}{2} - \frac{m^2}{2} \right)^2 = \frac{1}{2} \left(\frac{\partial m}{\partial s} \right)^2 \tag{27}$$

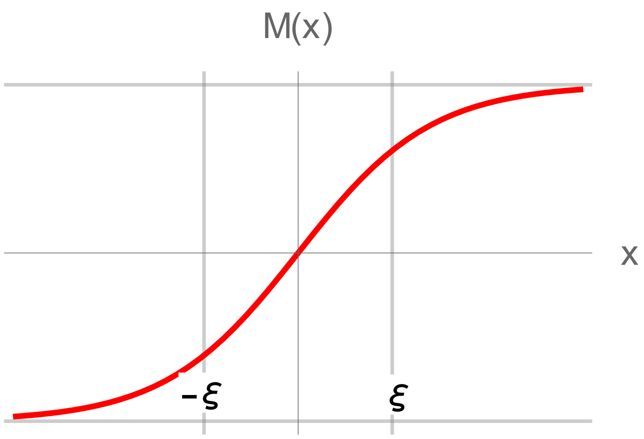
Faktorji $1/2$ stojijo tu, kot stojijo, kot so pač definirane bezdimenzijske količine, ki so definirane tako iz zgodovinskih razlogov. Rešitev enačbe dobimo s preprostim korenjenjem in integracijo rezultata te operacije:

[5]Bralec lahko za vajo pokaže, da odvajanje tako definirane Hamiltonove funkcije po x vodi točno do variacije f.

$$
\begin{aligned}
m'(s) &= \pm\frac{1}{\sqrt{2}}(1-m^2) \\
\int_0^{m(s)} \frac{\mathrm{d}m'}{1-m'^2} &= \frac{1}{\sqrt{2}}\int_{s_0}^{s} \mathrm{d}s
\end{aligned}
\tag{28}
$$

Integralske meje so izbrane tako, da je s_0 v sredini domenske stene in je $m(s_0) = 0$. Predznak je izbran tako, da magnetizacija samo narašča - z drugimi besedami izberemo $m(-\infty) = -1$ in $m(\infty) = 1$. Bežen pogled v tabelico elementarnih integralov pove, da integral na levi ustreza funkciji arctanh. Rezultat in spodaj prepisan rezultat v originalne enote:

$$
\begin{aligned}
m(x) &= \tanh\left(\frac{s-s_0}{\sqrt{2}}\right) \\
M(x) &= M_0 \tanh\left(\frac{x-x_0}{\sqrt{2}\,\xi}\right)
\end{aligned}
\tag{29}
$$



Slika 3: Oblika magnetizacije v domenski steni.

Rezultat se spodobi še fizikalno komentirati: v količine iz enačbe 25 lahko vstavimo vrednosti koeficientov iz 21.

$$
\begin{aligned}
M_0 &= \sqrt{-\frac{A}{2B}} \propto (T_C - T)^{1/2} \\
&\to \text{kritični eksponent } \beta = 1/2 \\
\xi &= \sqrt{-\frac{\tilde{A}}{2A}} \propto (T_C - T)^{-1/2} \\
&\to \text{kritični eksponent } \nu = 1/2
\end{aligned}
\tag{30}
$$

Prvi rezultat ni nič novega: v MFA je kritični eksponent β enak 1/2. Novost je, da nam je vpeljava dodatnega člena v prosto energijo omogočila določili mero za korelacijsko dolžino, ki je obratno odvisna od temperature s kritičnim eksponentom $\nu = 1/2$. Velja se spomniti, da smo tekom reševanja Brillouinovo funkcijo razvili za majhne argumente, torej imajo te rešitve veljavo za temperature malo pod T_C.

Iz rešitve $M(x)$ bi se lahko zdaj prepričali, da so členi, ki smo jih zanemarili v 17 res majhni: arctanh ima velik odvod v bližini ničji, drugje pa je odvod majhen.