PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET U NOVOM SADU

UTICAJ MEHANIČKIH OSCILACIJA NA FAZNI PRELAZ KOD FEROMAGNETIKA

DIPLOMSKI RAD IZ FIZIKE

ILIJIN ĐORĐE

S A D R Ž A J:

Feromagnetici su kristali koji pored atomske uređenosti imaju i spinsku uređenost (Fe, Co, Ni). Njihovi atomi imaju nepopunjene ljuske (3d) i neki rezultantni spin. Zahvaljujući posebnoj interakciji u kristalu među nepopunjenim elektronskim ljuskama. U energijski najpogodnijem stanju spinovi svih atoma su usmereni u istom pravcu.(Relativna magnetizacija $\sigma > 0$). Ta uređenost postoji međutim samo na temperaturama koje su niže od T_k, takozvane Kiri-jeve temperature. Uređena feromagnetna faza na toj temperaturi prelazi u neuređenu paramagnetnu fazu ($\sigma = 0$) jer se veze među spinovima usled toplote kidaju.

U prvom delu rada ukratko prikazujem izvođenje izraza za relativnu magnetizaciju feromagnetika (σ), posmatrajući feromagnetik kao skup uređenih spinova koji se ne pomeraju iz čvorova kristalne rešetke. Istražujući zatim σ u okolini tačke faznog prelaza ($\sigma \approx 0$) zaključujemo kolika je temperatura T_k faznog prelaza ($\sigma = 0$).

U drugom delu rada uzimam u obzir da atomi (spinovi) u kristalnoj rešetci na temperaturama $T \neq 0°K$ nisu statični nego osciluju oko ravnotežnih položaja. Uzimajući u obzir da su ta pomeranja mala i koristeći postupak iz prvog dela (spinski talasi, korišćenje Grin-ove funkcije), iz računavamo temperaturu prelaza novog modela. Pore deći je sa rezultatom prvog dela izvodimo zaklju čak kvalitetu i kvantitetu uticaja fonona na pre laz.

Prvi deo

Spinski talasi

Ponašanje feromagnetika možemo opisati pomoću Hajzenbergovog modela. Tada energija kristala sadrži član:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} \hat{S}_{\vec{n}} \cdot \hat{S}_{\vec{m}}$$

gde je $I_{\vec{n}-\vec{m}}$ "integral izmene" koji zavisi od prekrivanja elektronskih oblaka na mestima (u rešetci) $\vec{n}$ i $\vec{m}$. $\hat{S}_{\vec{n}}$ je operator spina u čvoru $\vec{n}$. Energija ima minimum kada su svi spinovi usmereni u istom pravcu. (negativan znak ispred sume)

Sa operatora vektora $\hat{S}$ prelazimo na projekcije u Dekart-ovom sistemu a sa ovih na nove operatore koji eksplicitno pokazuju spinske eksitacije. Predhodno Z-osu odabiramo u pravcu vektora magnetizacije.

Novi operatori su: $S^+ = S^x + i S^y$ $S^- = S^x - i S^y$, $(S - S^z) = S - S^z$.

Stanje feromagnetika određuje projekcija spina na Z-osu. Vektor stanja je $|S-K\rangle$, $(S-K)$ je vrednost Z projekcije, i sopstvena vrednost operatora S^z . Operator S^+ diže stanje za 1 $S^+ |S-K\rangle = |S-K+1\rangle$, (uzimamu kvant energije) a

S^- čini obratno.

Pretstavljen u novim operatorima Hamiltonijan ima oblik:

$$H = H_0 - \frac{1}{2}\sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}}\, S_{\bar{n}}^- S_{\bar{m}}^+ + SJ\sum_{n}(S - S_n^z) -$$
$$- \frac{1}{2}\sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}}\,(S - S_n^z)(S - S_{\bar{m}}^z)$$

H_0 je konstanta, u daljem računu nam nije potrebna, $J = \sum_{\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}}$.

Prvi član u energiji opisuje prenos ekscitacije sa čvora na čvor (spinske talase), drugi je kvantovana energija spinskih talasa, a zadnji član je energija interakcije spinskih talasa.

Prećićemo na druge oznake: $P^+ = S^-$, operator kreacije i $P = S^+$ operator anihilacije, i $P^+P = S - S^z$ broj elementarnih ekscitacija u sistemu spinova (Pauli operatori). Maksimalni spin (atoma) našeg feromagnetika uzimamo da je $S = \frac{1}{2}$. Posle smene dobijamo:

$$H = \frac{1}{2} J \sum_{n} P_n^+ P_n - \frac{1}{2}\sum_{nm} I_{\bar{n}-\bar{m}}\, P_n^+ P_m -$$
$$- \frac{1}{2}\sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}}\, P_n^+ P_n P_m^+ P_m$$

Uvešćemo i pojam relativne magnetizacije (magnetnog momenta po jednom atomu rešetke), koji je po definiciji:

$$\sigma = \frac{\langle S^z \rangle}{S} = 1 - 2\langle P_n^+ P_n \rangle$$

(Njen konkretniji izraz ćemo iskoristiti da odredimo tačku faznog prelaza).

Sada koristimo metod funkcije Grin-a: Ako izvršimo Furije transformaciju vreme - energija "radne jednačine funkcije Grin-a" dobijamo jednakost:

$$E \langle\langle P_f | P_g^+ \rangle\rangle = -\frac{\langle [P_f, P_g^+] \rangle}{2\pi} + \langle\langle [P_f, H] | P_g^+ \rangle\rangle$$

Koristeći komutacione osobine Pauli operatora pronalazimo vrednosti komutatora u gornjoj jednakosti i mesto nje dobijamo:

$$E \langle\langle P_f | P_g^+ \rangle\rangle = -\frac{\sigma}{2\pi} \delta_{fg} + \frac{1}{2} J \langle\langle P_f | P_g^+ \rangle\rangle -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_m I_{f-m} \langle\langle P_m | P_g^+ \rangle\rangle + \sum_m I_{fm} \langle\langle P_f^+ P_f P_m | P_g^+ \rangle\rangle -$$

$$- \sum_{\vec{m}} I_{\vec{f}-\vec{m}} \langle\langle P_m^+ P_m P_f | P_g^+ \rangle\rangle$$

posle uvođenja aproksimacije Tjablikova

$$\langle\langle P_f^+ P_f P_m | P_g^+ \rangle\rangle \approx \langle P_f^+ P_f \rangle \langle\langle P_m | P_g^+ \rangle\rangle$$

i analogne za drugu funkciju, zatim prelaska sa koordinata na impulse (opet Furije transformacijom) i sređivanja, dobijamo sledeći izraz za Grin-ovu funkciju:

$$\langle\langle P_k | P_k^+ \rangle\rangle = -\frac{\sigma}{2\pi} \cdot \frac{1}{E - \frac{\sigma}{2}(J - J_k)}$$

Iz izraza za Grin-ovu funkciju lako dobijamo energiju spinskog talasa (magnona), (realni deo pola funkcije Grin-a)

$$E(k) = \frac{\sigma}{2}(J - J_k)$$

Integraljenjem spektralne intenzivnosti Funkcije Grin-a dobijamo srednji broj magnona energije $E(k)$ na temperaturi T (impulsa k)

$$\langle P_k^+ P_k \rangle = \frac{\sigma}{e^{\frac{E(k)}{k_B T}} - 1}$$

Iz formule kojom smo definisali relativnu magnetizaciju σ i zadnjeg izraza, posle sređivanja, dobijamo implicitan izraz za σ:

$$\sigma = \frac{1}{\frac{1}{N}\sum_{k} \mathrm{cth}\,\frac{E(k)}{2k_B T}}$$

Za temperature koje su bliske tački prelaza σ ima vrlo malu vrednost ($\sigma \to 0$), i cothyp možemo razviti u red

$$\mathrm{cth}\,\frac{E(k)}{2\theta} \approx \frac{2\theta}{E(k)} + \frac{E(k)}{6\theta}$$

i dobiti

$$\sigma^2 = \frac{12\theta}{J}\left[1 - \frac{4\theta}{J}\left(\frac{1}{N}\sum_{k}\frac{1}{1 - J_k/J}\right)\right]$$

Naš model feromagnetika ima prostu kubnu strukturu, za nju ona suma (u poslednjoj formuli) ima vrednost približno 3/2. Za prostu kubnu strukturu u aproksimaciji prvih suseda $J = \sum_{\ell} I_\ell \approx 6 I_1$, i naš rezultat za σ je

$$\sigma = \sqrt{\frac{2\theta}{I}\left(1 - \frac{\theta}{I}\right)}$$

U tački faznog prelaza $\sigma = 0$, i $\theta_K = I$, ($\theta_K = K_B T_K$).

Drugi deo

Uticaj fononа

Opet polazimo od Hajzenberg-ovog hamiltonijana za feromagnetik, ali sada uzimamo u obzir da su atomi u pokretu (umesto u $\vec{n}$ atom se nalazi u $\vec{n}+\vec{u}_{\vec{n}}$, gde je $\vec{u}_{\vec{n}}$ vektor pomeraja atoma od ravnotežnog položaja (u čvoru rešetke), i veoma je mali (u odnosu na međuatomsko rastojanje u kristalu):

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}+\vec{u}_n-\vec{m}-\vec{u}_m}\, \hat{\vec{S}}_{\vec{n}}\cdot\hat{\vec{S}}_{\vec{m}}$$

Prvo vršimo Furije razvoj novog integrala izmene, zatim razvijemo u Tajlorov red član sa pomerajima zadržavši se na kvadratnom članu. Posle usrednjavanja po fononskom stanju $|n\rangle$ hamiltonijan dobija oblik:

$$\langle H\rangle = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}}\, \vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}} \;+$$

$$+\frac{1}{4N}\sum_{\vec{n}\vec{m}\vec{k}} J_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\cdot(\vec{n}-\vec{m})}\left\langle\left[\vec{k}\cdot(\vec{u}_{\vec{n}}-\vec{u}_{\vec{m}})\right]^2\right\rangle \vec{S}_{\vec{n}}\cdot\vec{S}_{\vec{m}}$$

ovaj drugi deo nam daje popravku na energiju usled fononskih pomaka.

Treba pronaći srednju vrednost izraza u uglastoj zagradi uzimajući u obzir operatorski oblik vektora pomeraja

$$\vec{u}_{\bar{n}} = \sum_{\bar{q}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\bar{q}j}}}\, \vec{l}_{\bar{q}j} \left(\hat{b}_{-\bar{q}j} + \hat{b}^{+}_{\bar{q}j} \right) e^{i\bar{q}\bar{n}}$$

($b_{\bar{q}j}$ i $b^{+}_{\bar{q}j}$ operatori anihilacije i kreacije fonona, $\vec{l}_{\bar{q}j}$ jedinični vektor polarizacije, $\omega_{\bar{q}j}$ frekvencija oscilovanja kristala.)

Rezultat srednje vrednosti je

$$\langle [K\cdot(u_{\bar{n}}-u_{\bar{m}})]^2 \rangle = \sum_{qj} \frac{\hbar}{MN\omega_{\bar{q}j}} (1+2n_{\bar{q}j})(K\cdot l_{qj})^2 \left[1 - e^{i\vec{q}(\bar{n}-\bar{m})}\right]$$

tako da naš Hamiltonijan dobija konačno izgled

$$\langle H \rangle = -\frac{1}{2} \sum_{nm} \left(I_{\bar{n}-\bar{m}} - 2A_{\bar{n}-\bar{m}} \right) \vec{S}_{\bar{n}} \cdot \vec{S}_{\bar{m}}$$

gde je :

$$A_{\bar{n}-\bar{m}} = \frac{\hbar}{4MN^2} \sum_{\bar{K}\bar{q}j} J_{\bar{K}} \frac{1+2n_{\bar{q}j}}{\omega_{qj}} (\bar{K}\cdot \bar{l}_{\bar{q}j})^2 \cdot$$

$$\cdot \left[e^{i\bar{K}(\bar{n}-\bar{m})} - e^{i(\bar{q}+\bar{K})(\bar{n}-\bar{m})} \right]$$

Oblik Hamiltonijana je isti kao i u prvom delu, te možemo iskorististi rešenje prvog dela. Za energiju magnona sada važi:

$$E(k) = \frac{\sigma}{2}\left[J - J(k) - 2\left(A - A(k)\right)\right]$$

ako potražimo izraz za σ u blizini kritične tačke, dobijamo

$$\sigma^2 = \frac{12\theta}{J-2A}\left[1 - \frac{4\theta}{N}\sum_{k}\frac{1}{J-J_k-2(A-A_k)}\right]$$

Suma je komplikovana, uprostićemo je uzimajući u obzir da je $A-A_k \ll J-J_k$, razvijajući u red i zanemarujući neke veličine

$$\frac{1}{N}\sum_{k} \approx \frac{1}{N}\sum_{k}\frac{1}{J-J_k} + \frac{2A}{J^2}$$

Izraz za magnetizaciju postaje:

$$\sigma^2 = \frac{12\theta}{J-2A}\left[1 - \theta\left(\frac{6}{J} + \frac{8A}{J^2}\right)\right]$$

odatle, temperatura prelaza je :

$$\theta = \frac{1}{\frac{6}{J} + \frac{8A}{J^2}} \approx \frac{J}{6} - \frac{8A}{36}$$

Fononska popravka $A = \sum_{\vec{e}} A_{\vec{e}}$ iznosi:

$$A = -\frac{\hbar}{4MN} \sum_{\vec{q}l} J_{\vec{q}} \frac{1+2n_{\vec{q}l}}{\omega_{\vec{q}l}} (\vec{q}\cdot \vec{e}_{\vec{q}l})^2$$

Sa ove sume prelazimo na integral. Setivši se da je jedna komponenta vektora polarizacije paralelna sa $\vec{q}$ a ostale dve normalne, naše A postaje:

$$A = -\frac{a^3\hbar}{4M(2\pi)^3} \int d^3\vec{q}\, J_{\vec{q}} \frac{1+2n_{\vec{q}}}{\omega_{\vec{q}}} q^2$$

Uzevši da je $J_q = J$, $\omega_q = Cq$, a srednji broj fono na $n_q \approx k_BT/\hbar Cq$ i rešavanje integrala postaje trivijalno. Brojne vrednosti našeg feromagnetika su: međuatomsko rastojanje $a = 2{,}5\,Å$, masa atoma $M = 10^{-22}\,g$, maksimalna vrednost impulsa $q_M = (6\pi^2)^{1/3}/a = 1{,}56\cdot 10^{8}\,cm^{-1}$, brzina zvuka u kristalu $C = 5\cdot 10^{5}\,m/s$. a $\hbar \approx 10^{-27}\,erg\cdot sec$

Za temperaturu oko tačke faznog prelaza ($\approx 10^{3}\,{}^\circ K$) veličina fononske popravke A je $\approx -6\cdot 10^{-3} J$

Konstante su približno kao u nikla, rešetka prosta kubna, $J \approx 6I$ gde je I integral izmene za dva atoma na rastojanju a , a θ :

$$\theta = I + 8 \cdot 10^{-3} I$$

Uticaj fonona je mali, temperatura prelaza feromagnetne faze u paramagnetnu se povećala za stoti deo ranije temperature ($\sim 10^{\circ}K$).

LITERATURA:

1. Č. Kitel - Uvod u fiziku čvrstog stanja
2. A. Davidov - Kvantna mehanika
3. Dž. Zajman - Principi teorije čvrstog stanja
4. V. Bonč-Bruevič - Metod funkcije Grin-a u statističkoj mehanici
5. A. Ahiezer - Spinski talasi
6. R. Sproul - Savremena fizika
7. R. Fejnman - Statistička mehanika
8. B. Tošić - Predavanja