Физика магнитных явлений

Иосиф Давидович Токман

11 Спиновой обменный оператор Дирака. Взаимодействие Ван-Флека-Гейзенберга.

К чему мы пришли? В основном мы занимались обменным взаимодействием. Это так причина, которая может объяснять эффективное азаимодействие частиц со спином. Это может объяснять ферромагнетизм и антиферромагнетизм.

В качестве объектов мы в основном рассматривали атом. И поняли почему может быть нескомпенсированный момент.

А что происходит в твердом теле? Есть ли какое-то упорядочение? Мы начнем с простых моделей.

Легко убедиться, что собственные значения и ссобственные ф-ии оператора:

$$\hat{V}_{ex} = -\frac{1}{2} J_{ex}(1 + 4\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2); \tag{1}$$

Действующего в пространстве спиноров:

$$\Phi_1 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2; \tag{2}$$

$$\Phi_3 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_2; \tag{3}$$

$$\Phi_2 = \begin{bmatrix} 1 \\ 0 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2; \tag{4}$$

$$\Phi_4 = \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_1 \begin{bmatrix} 0 \\ 1 \end{bmatrix}_2; \tag{5}$$

Тогда собственные значения получаются равными:

$$J_{ex} \to \Phi_2 - \Phi_3 = \Phi_a(1,2); \tag{6}$$

$$-J_{ex} \to \Phi_1 = \Phi_s^{+1}(1,2); \tag{7}$$

$$-J_{ex} \to \Phi_2 + \Phi_3 = \Phi_s^{0}(1,2); \tag{8}$$

$$-J_{ex} \to \Phi_4 = \Phi_s^{-1}(1,2); \tag{9}$$

Таким образом, при рассмотрении примера в разделе VIII мы интересовались бы лишь смещением уровней из-за обменного взаимодействия, то достаточно было бы рассмотреть оператор $\hat{V}_{ex}$ - спиновой обменный оператор Дирака.

И у нас сейчас единственная степень свободы - просто спин. А дальше надо сделать другие шаги.

Из $\hat{V}_{ex}$ видно, что *взаимодействие спинов изотропно и зависит лишь от взаимной ориентации спинов.* Т.е. состояния бесконечно вырождены по направлениям спинов.

Спиновой обменный оператор Дирака допускает важное обобщение. Пусть атомы с отличными от 0 спиновыми моментами располагаются в узлах кристаллической решётки. И пусть в следствии вида собственных значений между электронами соседних атомов существует обменное взаимодействие. Тогда, пользуясь усредненными величинами, оператор обменного взаимодействия между спиновыми моментами атомов может быть записан ввиде Гейзенберговского гамильтониана:

$$\hat{H}_{ex} = -\frac{1}{2}\sum_{i\neq j} J_{ij}\hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j; \tag{10}$$

Т.е. мы считаем обменные энергии зависящими лтшь от разницы координат частиц:

$$J_{ij} = J(|\vec{r}_i - \vec{r}_j|); \tag{11}$$

Такой гамильтониан 10 был введен Ван-Флеком, а ферромагнетизм был рассмотрен подробно Гейзенбергом. А что за полные оператьоры спина? Это должен быть оператор, действующий на атом целиком. В целом эта штука должны быть похожа на оператор полного момента. Если у нас n электронов в таком атоме, то матрицы $\hat{S}$ должын быть размером $2n+1$ - т.е. любому собственному орбитальному моменту мы сопоставляем отдельную "координату".

При этом ферромагнетизм отвечает $J_{ij} < 0$ - тогда энергия в состоянии со спинами в одну сторону будет наименьшей.

12 Локализованные невзаимодействующие моменты. Парамагнетизм.

Если есть невзаимодействующие спины но во внешнем поле. Пусть система состоит из N невзаимодействующих атомов, обладающих моментом J. Во внешнем статическом поле $\vec{\mathcal{H}}$ устроен следующим образом:

$$\hat{H} = \sum g_j \mu_B m_i \mathcal{H}; \tag{12}$$

Здесь $m = J_z = J \ldots - J$ - проекция момента отдельного атома, а $\vec{z} \Uparrow \vec{\mathcal{H}}$. Здесь мы пользуемся неявно векторной моделью атома. Считаем, что точными интегралами являются $J^2,\ J_z$, а хорошими интегралами $L,\ S$.

Понятно почему сохраняется J_z, а почему J^2 - ? Потому что здесь аналогия с вырожденной теорией возмущения - там мы берем в первом порядке возмущения функции соответствующие начальному вырожденному сотсоянию, не примешивая сторонние.

Как мы помним, при наложении внешнего поля у нас получалось:

$$\mu_B(\vec{L} + 2\vec{S})\vec{\mathcal{H}} = \mu_B(\vec{J} + \vec{S})\vec{\mathcal{H}} = \mu_B(\vec{J}_z + \vec{S}_z)\mathcal{H}; \tag{13}$$

Можем предположить:

$$S_z = \left|\vec{S}\right| \cos\left(\vec{S};\vec{J}\right) \cos\left(\vec{J};\vec{\mathcal{H}}\right); \tag{14}$$

Раскладывая по проекциям можем получить:

$$\cos\left(\vec{J};\vec{\mathcal{H}}\right) = \frac{J_z}{\left|\vec{J}\right|}; \tag{15}$$

А также запишем, исходя из коммутационных соотношений:

$$\left|\vec{S}\right|\left|\vec{J}\right|\cos\left(\vec{S};\vec{J}\right) = \frac{1}{2}\big(J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)\big); \tag{16}$$

В таком случае:

$$S_z = \frac{\sqrt{S(S+1)}}{\sqrt{S(S+1)}}\frac{J_z}{J(J+1)}\frac{1}{2}\big(J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)\big); \tag{17}$$

Тогда в итоге у нас получится:

$$\mu_B(\vec{L}+2\vec{S})\vec{\mathcal{H}} = \mu_B J_z\big(1 + \frac{J(J+1) - L(L+1) + S(S+1)}{2J(J+1)}\big)\vec{\mathcal{H}}; \tag{18}$$

Это у нас получается фактор Ланде. Теперь попробуем вычислить статсумму.

$$Z_N = \left(\sum_{m=-J}^{J}\exp\left(-\frac{g_J\mu_B m\mathcal{H}}{T}\right)\right)^N; \tag{19}$$

Это в случае отсутствия взаимодействия - тогда статсумма полной системы - просто произведение статсумм отдельных элементов. Можно показать, что:

$$Z_N = \left(\frac{\sinh\left(\frac{2J+1}{2J}x\right)}{\sinh\left(\frac{x}{2J}\right)}\right)^N = (Z)^N; \tag{20}$$

При этом безразмерная величина:

$$x = \frac{g_J\mu_B J\mathcal{H}}{T}; \tag{21}$$

Отсюда видно понятие "высокой температуры когда $x \ll 1$.
В равновесии у нас проекция получится равной:

$$\langle M_z\rangle = \sum_{conf}\big(-\sum_{i=1}^{N} g_J\mu_B m_i\big)\exp\left(-\frac{\sum_{i=1}^{N} g_J\mu_B m_i\mathcal{H}}{T}\right)/Z_N; \tag{22}$$

И когда мы все это посчитаем, то увидим:

$$\langle M_z\rangle = \frac{N g_J\mu_B\sum_{m=-J}^{J} m\exp(mx/J)}{Z}; \tag{23}$$

Легко показать, что:

$$\langle M_z\rangle = N g_J\mu_B J B_J(x); \tag{24}$$

Где подразумевается т.н. функция Бриллюэна:

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J}\coth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J}\coth\left(\frac{x}{2J}\right); \tag{25}$$

Рассмотрим предельный случай высокой температуры $x \ll 1$. Тогда:

$$B_J(x) \approx \frac{J+1}{3J}x; \tag{26}$$

В таком случае средний момент:

$$\langle M_z \rangle \approx \frac{Ng_J^2 J(J+1)}{3T}\mathcal{H}; \tag{27}$$

Но есть еще и магнитная *восприимчивость*. В данном случае она подчиняется закону Кюри:

$$\chi = \frac{\partial \langle M_z \rangle}{\partial \mathcal{H}} = \frac{Ng_J^2 \mu_B^2 J(J+1)}{3}\frac{1}{T}; \tag{28}$$

А что будет, когда температура низка?

$$\langle M_z \rangle \approx Ng_J \mu_B J \left(1 - \frac{1}{J}\exp\left(-\frac{g_J \mu_B \mathcal{H}}{T}\right)\right); \tag{29}$$

Можно видеть что при абсолютном нуле:

$$\langle M_z \rangle \rightarrow_{T\rightarrow 0} Ng_J \mu_B J; \tag{30}$$

Но тогда восприимчивость:

$$\chi = \frac{Ng_J^2 \mu_B^2}{T}\exp\left(-\frac{g_J \mu_B \mathcal{H}}{T}\right); \tag{31}$$

Видно, что она обращается в ноль. Это за счет того, что все атомы и так уже упорядочены.

А теперь попробуем все это упорядочить за счет еще и взаимодействия самих атомов.

13 Ферромагнетизм "на пальцах". Модель Кюри-Вейса. Приближение среднего (молекулярного) поля.

Первое, что можно предположить - пусть остальные частицы создают некоторое среднее поле, тогда все остальное идёт уже по накатанной.

Гейзенберговский гамильтониан 10 является подходящей основой для теориии магнетизма в диэлектриках, где электроны достаточно хорошо локализованны, а магнитный мент связан именно со спинами. Это предположение в точности выполняется в атомах или ионах, где $L = 0$, неапример в Mn^{2+}, Gd^{2+}. Кроме того, 10 может описывать магнетизм и в переходных металлах Fe, Co, Ni. Намагниченность этих металлов обусловлена спинами d электронов, которые хорошо локализованны.

Вспомним, что мы рассматривали Fe - последние 2-е оболочки d, s, причем d - не заполнено до конца, а еще она по радиусу меньше. Это в отдельном атоме. При этом в кристалле электронные состояния становятся делокализованными. Это - причина того, что энергетический уровень превращается в зону.

Когда делокализуется d электрон - зона получается очень узкой. У них оказывается очень большая масса, низка подвихность, поэтому они оказываются практически неподвижными.

Поэтому в грубой модели есть 2-е группы электронов - легкие и подвижные s электроны, а еще и "локализованные"d электроны. Т.е. мы "забываем"про то, что они образуют зону.

Из 10 видно, что если $J_{ij} > 0$, то энергетически выгодным при $T = 0$ является состояние, где все спины $\vec{S}$ сонаправленны - ферромагнитное упорядочение. В образце возникает спонтанный магнитный момент $\vec{M}$. По мере роста температуры происходит расупорядочение спинов (спонтанный магнитный момент уменьшается).

Точка, при которой спонтанный магнитный момент обращается нуль $\vec{M} = 0$. Простейшее описание ферромагнетика можно получить в рамках среднего поля. Рассматривается спин отдельного атома. Все взаимодействие спина этого атома со спинами остальных атомов (в рамках Гейзенберговсеого гамильтониана) заменяется взаимодействием с некоторым эффективным полем. *По идее Вейса это эффективное (как бы магнитное) поле пропорционально среднему истинному магнитному моменту кристалла.*

Выделим в 10 спин отдельного атома. Т.е. запишем исходя из 10 гамильтониан одного атома.

$$\hat{H}_{ex,i} = -\hat{\vec{S}}_i J_0 \sum_{j=1}^{Z} \hat{\vec{S}}_j; \tag{32}$$

В 32 учтено взаимодействие с ближайшими соседями. И положено $J_{ij} = J_0$. Если сопоставить этому гамильтониану взаимоджействие с неким "мигнитным"полем $\mathcal{H}_{eff}$, то:

$$\hat{H}_{ex} = g_s \mu_B \hat{\vec{S}}_i \mathcal{H}_{eff}; \tag{33}$$

В соответствии с идеей Вейса в 32 заменим $\hat{\vec{S}}_j \to \langle \hat{\vec{S}}_j \rangle$. Тогда наше эффективное поле:

$$\mathcal{H}_{eff} = -\frac{J_0}{g_s \mu_B} \sum_{j=1}^{z} \langle \hat{\vec{S}}_j \rangle = -\frac{J_0 z}{g_s \mu_B} \langle \hat{\vec{S}} \rangle; \tag{34}$$

Тогда для полного магнитного момента кристалла получим что-то вроде:

$$\vec{M} = -N g_s \mu_B \langle \hat{\vec{S}} \rangle; \tag{35}$$

Из этих соотношений 34, 35 мы имеем:

$$\mathcal{H}_{eff} = \frac{z J_0}{N g_s^2 \mu_B^2} \vec{M} = \gamma \vec{M}; \tag{36}$$

Здесь γ - коэффициент молеклярного поля Вейса:

$$\gamma = \frac{z J_0}{N g_s^2 \mu_B^2}; \tag{37}$$

теперь мы сможем применять уже готовые формулы для внешнего магнитного поля.