

22. Feromagnetizmus

V tejto prednáške skonštruujeme najjednoduchšiu teóriu popisujúcu feromagnetizmus izolantov. Najprv objasníme pôvod silných interakcií medzi magnetkami.

Heisenbergova výmenná interakcia

Dipól-dipólová interakcia medzi dvomi magnetkami $\vec{\mu}_1$ a $\vec{\mu}_2$ vo vzdialenosti r je

$$H = \frac{\mu_0}{4\pi r^3} [\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - 3(\mathbf{n} \cdot \vec{\mu}_1)(\mathbf{n} \cdot \vec{\mu}_2)]$$

kde $\mathbf{n}$ je jednotkový vektor v smere spojnice magnetiek. Pre magnetky veľkosti Bohrovho magnetónu vo vzdialenosti Bohrovho polomeru dostaneme typickú interakčnú energiu 10^{-4} eV, čo je omnoho menej, ako pozorované teploty prechodu do magnetického stavu.¹

Heisenberg poukázal na existenciu omnoho silnejších síl medzi magnetkami. Skúmame dva elektróny, z ktorých jeden obsadzuje orbitál φ a druhý obsadzuje orbitál ψ . Keďže elektróny nesú spin $1/2$, existujú 4 možné spinové stavy, v ktorých sa náš dvojelektrónový systém môže nachádzať: $\uparrow\uparrow, \uparrow\downarrow, \downarrow\uparrow, \downarrow\downarrow$. Ak budeme predpokladať, že hamiltonián H dvojelektrónového systému nezávisí od spinových premenných, potom vlastné stavy H možno klasifikovať celkovým spinom S systému. V kvantovej mechanike sa ukazuje, že celkový spin sústavy dvoch spinov $1/2$ môže byť alebo $S = 0$ (singletný stav), alebo $S = 1$ (existujú tri takéto stavy, odlišujúce sa priemetom spinu S^z na os z , preto názov tripletný stav). Hoci orbitály, v ktorých sa elektróny nachádzajú, sú zakaždým rovnaké, v dôsledku coulombovských interakcií môže byť energia singletného stavu E_S rôzna od energie E_T tripletných stavov.² Preto môžeme písať

$$H = E_S + \frac{1}{2}(E_T - E_S)\mathbf{S}^2$$

Ak si však uvedomíme, že operátor celkového spinu je súčtom operátorov spinov oboch elektrónov, $\mathbf{S}^2 = (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2)^2 = \mathbf{S}_1^2 + \mathbf{S}_2^2 + 2\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2$, a ak uvažíme, že pre spin $1/2$ je $\mathbf{S}_1^2 = \mathbf{S}_2^2 = \frac{1}{2}(\frac{1}{2} + 1) = \frac{3}{4}$, potom hamiltonián možno písať v tvare

$$H = E_0 - J\mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2; \quad J = E_S - E_T; \quad E_0 = \frac{1}{4}(E_S + 3E_T)$$

Energia J sa nazýva Heisenbergova výmenná interakcia. V závislosti od konkrétneho systému môže byť $J > 0$ (feromagnetická väzba) alebo $J < 0$ (antiferomagnetická väzba). J je dané rozdielom coulombovských energií a preto môže byť veľké.³

Heisenbergov model

Budeme skúmať systém magnetiek lokalizovaných v bodoch i jednoduchej kubickej mriežky. Pre jednoduchosť budeme magnetky reprezentovať spinmi $\mathbf{S}_i$ o veľkosti $1/2$. Budeme predpokladať, že každý spin interaguje prostredníctvom feromagnetickkej Heisenbergovej výmennej interakcie $J > 0$ s okolitými šiestimi spinmi. Naviac budeme predpokladať, že systém magnetiek sa nachádza v externom magnetickom poli $\mathbf{B}$. Potom hamiltonián systému magnetiek je

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - \mathbf{B} \cdot \sum_i \vec{\mu}_i; \quad \text{Heisenberg} \quad (1)$$

kde $\langle i, j \rangle$ označuje najbližších susedov na mriežke (pričom každý pár je započítaný iba raz). Heisenbergovým modelom sa v literatúre nazývajú aj rôzne modifikácie modelu (1), napríklad modely s inou veľkosťou spinu, inou mriežkou, rôznymi znamienkami J , atď.

Priblíženie stredného poľa

V Heisenbergovom modeli pôsobí na zvolenú magnetku i okrem externého poľa $\mathbf{B}$ aj interné pole $\mathbf{B}_i$ od susedných spinov:

$$-\mathbf{B} \cdot \vec{\mu}_i - J \sum_j^{\text{nn}} \mathbf{S}_j \cdot \mathbf{S}_i = -(\mathbf{B} + \mathbf{B}_i) \cdot \vec{\mu}_i; \quad \mathbf{B}_i = -\frac{J}{2\mu_B} \sum_j^{\text{nn}} \mathbf{S}_j$$

¹Napríklad v La_2CuO_4 sa spiny iónov Cu^{2+} usporiadajú do tzv. antiferomagnetického stavu pri teplote $T_c \approx 320$ K. Tento materiál je izolant, ktorého dopovaním vzniká vysokoteplotná supravodivosť.

²Z podobných dôvodov ako pri Hundových pravidlách.

³Napríklad v La_2CuO_4 je $J \approx -0.13$ eV.

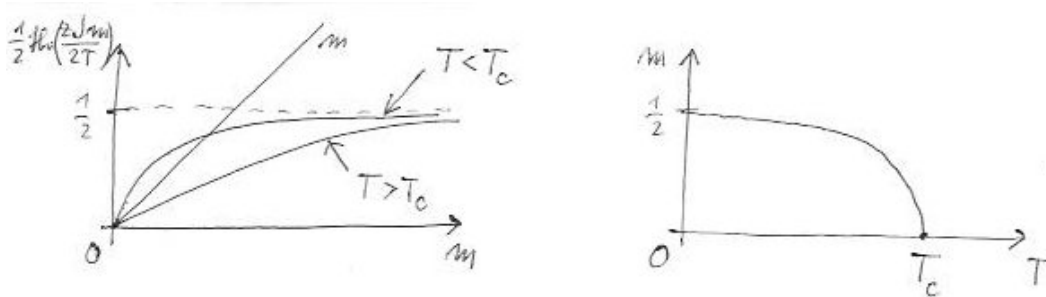
kde symbol $\sum_j^{\text{nn}}$ označuje sumáciu cez najbližších susedov spinu i . Predpokladajme teraz, že magnetické pole je orientované v smere osi z a má veľkosť $-B$. Potom očakávame nenulovú strednú hodnotu priemetu spinu $\langle S_i^z \rangle = m$. V priblížení stredného poľa nahradíme interné pole od susedných spinov jeho strednou hodnotou $\mathbf{B}_i = (0, 0, -\frac{zmJ}{2\mu_B})$ (kde z je počet najbližších susedov na mriežke). Preto zvolený spin sa v tomto priblížení nachádza v efektívnom poli $B_{\text{eff}} = -B - \frac{zmJ}{2\mu_B}$ v smere osi z . Voľná energia spinu $1/2$ v poli B_{eff} je

$$F(B_{\text{eff}}, T) = -T \ln \left(2 \cosh \frac{\mu_B B_{\text{eff}}}{T} \right)$$

Preto stredná hodnota magnetického dipólu v smere osi z je $\langle \mu \rangle = -\frac{\partial F}{\partial B_{\text{eff}}} = \mu_B \tanh \frac{\mu_B B_{\text{eff}}}{T}$. Ak ďalej využijeme vzťah $\langle \mu \rangle = -2\mu_B \langle S^z \rangle = -2\mu_B m$, môžeme písať self-konzistentnú rovnicu pre m :

$$m = \frac{1}{2} \tanh \frac{-\mu_B B_{\text{eff}}}{T} = \frac{1}{2} \tanh \frac{\mu_B B + zmJ/2}{T}; \quad m = \frac{1}{2} \tanh \frac{zmJ}{2T}$$

Druhá rovnica platí pre nulové aplikované pole. Z grafického riešenia self-konzistentnej rovnice pre nulové aplikované pole vidno, že pre teploty $T > T_c = zJ/4$ existuje jediné riešenie $m = 0$. Toto riešenie popisuje paramagnetickú fázu spinov. Pri teplotách $T < T_c$ však okrem riešenia $m = 0$ existuje aj riešenie s $m \neq 0$. Dá sa ukázať,⁴ že v priblížení stredného poľa je voľná energia netriviálnej fázy nižšia ako paramagnetickej fázy.



Netriviálne riešenie $m \neq 0$ popisuje feromagnetickú fázu. V tejto fáze je spontánne narušená symetria: hamiltonián (1) je pre $B = 0$ invariantný voči otočeniu všetkých spinov okolo danej spoločnej osi o daný spoločný uhol,⁵ t.j. je izotropný v spinovom priestore, avšak stav s $m \neq 0$ má v spinovom priestore význačný smer (a síce smer, v ktorom sú magnetky “zamrznuté”).

Veličinu $m = \langle S^z \rangle$ nazývame parametrom usporiadania. Parametrom usporiadania totiž nazývame akúkoľvek veličinu, ktorej hodnota je striktné nulová v jednej (neusporiadanej) fáze a nenulová v druhej fáze. Pojmy parametra usporiadania a spontánneho narušenia symetrie nie sú viazané na priblíženie stredného poľa.

Teplotnú závislosť m možno v priblížení stredného poľa určiť zo self-konzistentnej rovnice. V blízkosti T_c je magnetizácia m malá. Ak využijeme Taylorov rozvoj funkcie tanh, dostaneme

$$m \approx \frac{1}{2} \left[\frac{zmJ}{2T} - \frac{1}{3} \left(\frac{zmJ}{2T} \right)^3 \right]; \quad m \approx \frac{1}{2} \sqrt{\frac{3(T_c - T)}{T_c}}$$

Naopak, pre $T \ll T_c$ očakávame, že argument funkcie tanh je veľký a preto $m \approx \frac{1}{2} - e^{-\frac{zJ}{2T}}$. Na intervale medzi 0 a T_c je spontánna magnetizácia m monotónne klesajúcou funkciou.

Spinové vlny

Preskúmame excitácie, ktoré vznikajú pri deformovaní základného stavu feromagnetu. Podobne ako v prípade kmitov mriežky, začneme s riešením klasického problému.

Skúmame feromagnet v nulovom aplikovanom poli. Nech okamžitá konfigurácia spinov je $\{\mathbf{S}_i\}$. Potom elementárna magnetka $\vec{\mu}_i$ sa nachádza v internom magnetickom poli

$$\mathbf{B}_i = -\frac{J}{2\mu_B} \sum_j^{\text{nn}} \mathbf{S}_j$$

⁴Vid' cvičenia

⁵T.j. energia stavu sa nezmení pri takejto transformácii stavu.

Časová zmena momentu hybnosti magnetky $\vec{\mu}_i = -2\mu_B \mathbf{S}_i$ musí byť rovná momentu sily pôsobiacej na magnetku, $\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = \vec{\mu}_i \times \mathbf{B}_i$. Po dosadení za interné pole dostaneme nekonečný systém rovníc pre časový vývoj spinov:

$$\hbar \frac{d\mathbf{S}_i}{dt} = J \mathbf{S}_i \times \sum_j^{\text{nn}} \mathbf{S}_j$$

Tento systém rovníc je nelineárny. Pre malé kmity však platí $\mathbf{S}_i = \mathbf{m} + \mathbf{s}_i$ kde $\mathbf{m} = (0, 0, 1/2)$ je magnetizácia základného stavu a $|\mathbf{s}_i| \ll 1$ je výchylka od základného stavu. Systém pohybových rovníc pre $\mathbf{s}_i$ možno linearizovať:

$$\hbar \frac{d\mathbf{s}_i}{dt} = J \sum_j^{\text{nn}} (\mathbf{m} + \mathbf{s}_i) \times (\mathbf{m} + \mathbf{s}_j) \approx J \sum_j^{\text{nn}} (\mathbf{s}_i - \mathbf{s}_j) \times \mathbf{m}$$

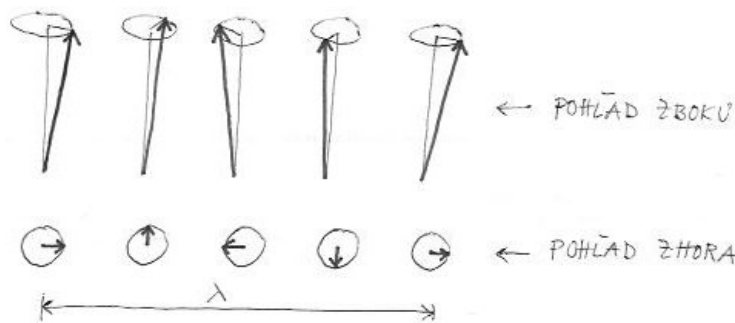
Tento systém vektorových rovníc možno písať v kartézskych súradniciach:

$$\hbar \frac{ds_i^x}{dt} = \frac{J}{2} \left(zs_i^y - \sum_j^{\text{nn}} s_j^y \right); \quad \hbar \frac{ds_i^y}{dt} = -\frac{J}{2} \left(zs_i^x - \sum_j^{\text{nn}} s_j^x \right); \quad \hbar \frac{ds_i^z}{dt} = 0$$

Dostali sme systém rovníc, ktorý je podobný rovniciam pre klasické kmity kryštálu. Preto riešenie opäť hľadáme v tvare rovinných vln, $\mathbf{s}_i = \mathbf{s} e^{i\mathbf{k} \cdot \mathbf{r}_i - i\omega t}$. Nekonečný systém rovníc sa potom redukuje na hľadanie riešenia trojrozmerného problému

$$\begin{pmatrix} i\hbar\omega & J\gamma_{\mathbf{k}} & 0 \\ -J\gamma_{\mathbf{k}} & i\hbar\omega & 0 \\ 0 & 0 & i\hbar\omega \end{pmatrix} \begin{pmatrix} s^x \\ s^y \\ s^z \end{pmatrix} = \begin{pmatrix} 0 \\ 0 \\ 0 \end{pmatrix}$$

kde sme zaviedli označenie $\gamma_{\mathbf{k}} = \frac{1}{2} (z - \sum_{\vec{\tau}} e^{i\mathbf{k} \cdot \vec{\tau}})$, pričom spojnice zvoleného spinu s jeho najbližšími susedmi sme označili vektormi $\vec{\tau}$. Ak predpokladáme, že spiny ležia v bodoch jednoduchej kubickéj mriežky s mriežkovou konštantou a , potom $\gamma_{\mathbf{k}} = 3 - \cos k_x a - \cos k_y a - \cos k_z a$.



Všimnime si, že riešenia spĺňajú rovnicu $s^z = 0$, t.j. odchýlka od rovnovážnej konfigurácie mení lokálny smer magnetizácie, ktorý precesuje okolo smeru magnetizácie v základnom stave. Netriviálne riešenia pre s^x, s^y sa nazývajú spinové vlny. Ich disperzný zákon dostaneme z podmienky nulovosti determinantu:

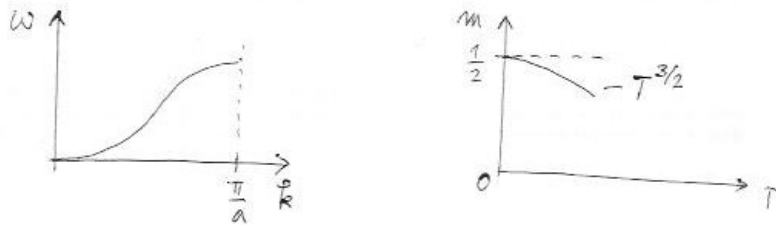
$$\hbar\omega_{\mathbf{k}} = J\gamma_{\mathbf{k}}; \quad \hbar\omega_{\mathbf{k}} \rightarrow \frac{1}{2} J a^2 \mathbf{k}^2$$

Druhá rovnica platí v dlhovlnnej limite a ukazuje, že v tejto limite majú spinové vlny nekonečne malú energiu. Tento výsledok platí aj v presnej teórii a možno ho zdôvodniť na základe nasledovnej úvahy: Feromagnetizmus v Heisenbergovom modeli sa realizuje spontánnym narušením spojitej symetrie. Preto očakávame, že ak sa smer magnetizácie bude pomaly meniť v priestore, energia takto deformovaného stavu bude infinitezimálne blízko k energii dokonalého feromagnetu.

Kvantová teória spinových vln: magnóny

V kvantovomechanickej formulácii je $\mathbf{S}_i$ operátorom. Hlavná komplikácia spočíva v tom, že jednotlivé zložky vektorového operátora $\mathbf{S}_i$ navzájom nekomutujú. Možno však ukázať, že malé odchýlky od

základného stavu feromagnetu majú charakter spinových vln a disperzný zákon je totožný s klasickým výsledkom. Navyše vieme, že energia kmitov v móde s daným $\mathbf{k}$ nie je spojito premenlivá, ale pribúda v násobkoch $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$. Kvantum spinových vln sa nazýva magnón. Magnón sa správa ako reálna častica s hybnosťou $\hbar\mathbf{k}$, energiou $\hbar\omega_{\mathbf{k}}$ a spinom $S = 1$. Disperzný zákon magnónov možno merať analogicky ako pre fonóny pomocou rozptylu neutrónov, pretože neutróny majú nenulový spin, ktorý interaguje so spinom magnónov.



Nakoniec ukážeme, ako tepelná excitácia magnónov znižuje celkový magnetický moment vzorky. Skúmame vzorku pozostávajúcu z N spinov $1/2$. Nech je priemet na os z celkového spinu vzorky v základnom stave $S^z = N/2$. Pri konečnej teplote T budú vo vzorke excitované magnóny, pričom ich počet bude daný Boseho-Einsteinovým rozdelením. Každý magnón znižuje S^z vzorky o 1, preto pri teplote T bude

$$S^z = \frac{N}{2} - \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{e^{\hbar\omega_{\mathbf{k}}/T} - 1} = N \left[\frac{1}{2} - \left(\frac{a}{2\pi} \right)^3 \int \frac{d^3\mathbf{k}}{\exp \frac{Ja^2k^2}{2T} - 1} \right] = N \left[\frac{1}{2} - \frac{1}{4\pi^2} \left(\frac{2T}{J} \right)^{3/2} \int_0^\infty \frac{dx\sqrt{x}}{e^x - 1} \right]$$

Keďže $S^z = Nm$, kde m je stredná hodnota spinu, dostaneme nakoniec tzv. Blochov zákon

$$m = \frac{1}{2} - 0.0586 \left(\frac{2T}{J} \right)^{3/2}$$

Pre materiály, ktoré možno popísať izotropným Heisenbergovým modelom, je Blochov zákon v zhode s experimentálnymi výsledkami.