Magnetne lastnosti

• Diamagnetizem in paramagnetizem

$\vec{H} = 0$: $\vec{M} = 0$ ↳ snovi brez spontane magnetizacije

$\vec{M}(\vec{H}=0) = \vec{M}_S \neq 0$ → feromagnetne snovi imajo spontano magnetizacijo

$\vec{H} \neq 0$: pojavi se magnetizacija, sorazmerna z zunanjim magnetnim poljem

jakost mag. polja

$\vec{M} = \underline{\chi}\,\vec{H}$ $\underline{\chi}$... tenzor magnetne susceptibilnosti

(linearen odziv, v splošnem velja za majhna polja)

dipolni momenti v snovi

$\vec{B} = \mu_0(\vec{H} + \vec{M}) = \mu_0 \underbrace{(\mathbb{1} + \underline{\chi})}\vec{H}$

gostota mag. polja

$\underline{\mu}$... permeabilnost (tenzor)

$\underline{\chi}$ - ni nujno izotropen, (je v npr. tekočinah), ima pa lastne osi & vrednosti χ_ℓ

$\chi_\ell > 0$: paramagnetizem → pr. en. pada v poljem

$\chi_\ell < 0$: diamagnetizem → prosta en. narašča v poljem

Energija snovi v zunanjem polju ($\vec{H} \neq 0$):

$\vec{H} = \vec{H}_0 - \vec{M}\cdot\vec{B}_0 V$

mag. momenti se želijo usmeriti v smeri zun. mag. polja

(majhne zanke)

$\vec{M} = \frac{1}{V}\sum_i \vec{\mu}_i$ ... klasična vsota po vseh mag. dipolnih moment. v snovi

$\vec{H} = \vec{H}_0 - \sum_i \vec{\mu}_i \vec{B}_0$

pri $T > 0$: $\beta = \frac{1}{k_B T}$

kvantno (klasično integral)

računamo fazno vsoto po vseh stanjih $Z = e^{-\beta F} = tr\left(e^{-\beta H}\right) = \sum_n \langle n | e^{-\beta H} | n \rangle$

↳ prosta energija : $F = -k_B T \ln Z$

$$\boxed{\vec{M} = -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial \vec{B}_0} = \frac{tr\left(\vec{M} e^{-\beta H}\right)}{tr\left(e^{-\beta H}\right)}}$$

← pričakovana vrednost magnetizacije

$$\boxed{\underline{\chi} = \frac{\partial \vec{M}}{\partial \vec{H}}\Big|_{\vec{H}=0} = \frac{1}{V\mu_0}\frac{\partial^2 \vec{F}}{\partial \vec{B}_0 \partial \vec{B}_0}\Big|_{\vec{H}=0}}$$ 9 komponent => TENZOR

- Bohr-van Leeuven teorem: $\boxed{F(\vec{B}_0) = F_0}$ v klasični mehaniki (polje se da izločiti iz proste energije) (pri $T > 0$)
  - ↳ vpeljava polja v klasični mehaniki: $\vec{p} \to \vec{p} - e\vec{A}$ (impulz zamenjamo z)
  - ↳ magnetne lastnosti so posledica kvantne mehanike

- Kvanten opis magnetnih pojavov:

★ Atomska susceptibilnost

$\vec{B}_0 \neq 0$

$\vec{B} = \nabla \times \vec{A} = \vec{B}_0$ (pri fiksnem B_0 izbira $\vec{A}$ ni enolična)

$\vec{A} = -\frac{1}{2}\vec{r} \times \vec{B}_0$ nam da homogeno polje

tirni prispevek: spinski prispevek

$$\hat{H} = \sum_i \frac{|\vec{p}_i - e\vec{A}|^2}{2m} + g_0\mu_B \sum_i \vec{s}_i \cdot \vec{B}_0 + \hat{H}_{int}$$

(obravnavali bomo le e^-) $(g_0 = 2{,}003\ldots)$ $g_0 \doteq 2$ → členi, ki NE vsebujejo polja

ker je e^- negativen

$e = -e_0$

$\hat{p}_i = -i\hbar\nabla_i$ (x, p)

brez polja

$$|\hat{p}_i - e\vec{A}|^2 = p_i^2 + e_0(\vec{p}_i\vec{A} + \vec{A}\vec{p}_i) + e_0^2 A^2$$

$\vec{A}$ lahko izberemo tako, da je $\underline{\nabla\vec{A} = 0}$

$\nabla(A\cdot\varphi) = \varphi\underbrace{\nabla\vec{A}}_{\emptyset} + \vec{A}\nabla\varphi$ → vrstni red postane nepomemben.

$$2e_0\vec{p}_i\vec{A} = 2e_0\vec{p}_i\cdot\frac{1}{2}(\vec{r}_i \times \vec{B}_0) = e_0(\underbrace{\vec{r}_i \times \vec{p}_i}_{\hat{\vec{l}}_i})B_0$$

$\hat{\vec{l}}_i$ ... vrtilna kol. i-tega delca

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \sum_i \frac{e_0}{2m}\vec{l}_i\vec{B}_0 + \frac{e_0^2}{2m}\sum_i A_i^2 + g\mu_B\sum_i \vec{s}_i\cdot\vec{B}_0$$

$A_i^2 \to \frac{1}{4}\rho_i^2 B_0^2$

$$\hat{H} = \underbrace{-\sum_i \vec{\mu}_i\vec{B}_0}_{-\vec{\mu}\cdot\vec{B}_0} + \frac{e_0^2}{8m}\sum \rho_i^2 B_0^2 + \hat{H}_0 = \hat{H}_0 + \hat{H}'$$

$$\boxed{\mu_B = \frac{e_0\hbar}{2m} = \frac{10^{-5}\,eV}{T} \quad \text{Bohrov magneton}}$$

$$\vec{\mu} = -g\mu_B\sum_i \vec{s}_i - \sum_i \overbrace{\frac{e_0\hbar}{2m}}^{\mu_B}\vec{l}_i = -\mu_B(\underbrace{\vec{L}}_{=\sum_i \vec{l}_i} + g\underbrace{\vec{S}}_{=\sum_i \vec{s}_i})$$

v splošnem je efekt mag. polja zelo majhen

Radi bi izračunali susceptibilnost.

• Kakšen bo efekt zun. mag. $\perp$ polja pri $T=0$?

$F(T=0) = E_0$ ↳ spreminjanje en. osnovnega stanja s poljem

$$\Delta E_0 = \langle 0|H'|0\rangle + \sum_{n\neq 0} \frac{\langle 0|H'|n\rangle^2}{E_0^0 - E_n^0} + \dots$$

(po perturbacijski teoriji) en. neperturbiranega os. - n-tega stanja

$$\Delta E_0 = \underbrace{-\langle 0|\vec{\mu}\vec{B}_0|0\rangle}_{\sim 10^{-5}\,eV} + \underbrace{\frac{e_0^2}{8m}\sum_i \langle 0|\rho_i^2|0\rangle B_0^2}_{\sim +10^{-10}\,eV} + \underbrace{\sum_{n\neq 0}\frac{\langle 0|\vec{\mu}\vec{B}_0|n\rangle^2}{E_0^0 - E_n^0}}_{\sim -10^{-10}\,eV}$$

Langevin para; Larmor dia

(vedno >0) → da diamagnetizem

<0 prispevek (ker je $E_n^0 > E_0^0$)

van Vleck para

pri $B_0 \sim 1T$

↳ poznati moramo osnovna stanja v atomu (več e^-, ker nas H atom ne zanima!)

→ osnovno stanje e^- v atomu (ionu)

Hundova pravila:

• stanja elektronov:

- enoelektronska stanja klasificiramo z $|n\ l\ m\ s\ s_z\rangle$

radialno kvantno št.; vrtilna količina; $-l \leq m \leq l$; $(s = \frac{1}{2})$; $\pm\frac{1}{2}$; $l \leq n-1$

- E_{nl} => podlupina

Običajno je en. odvisna od n & l (le v H-at. le od n!)

- degeneracija znotraj podlupine

$$D = 2\cdot(2l+1)$$

• Coulombski odboj med e^- povzroči, da stanja niso več neodvisna → rabimo nova dobra kvantna števila

↳ dobra kv. št. bodo torej:

• $\vec{L}_i \rightarrow \vec{L} = \sum_i \vec{L}_i$ (velikost^2, z-komponenta)

$\hat{L}^2 = L(L+1)$, $\hat{L}_z = m_L$ (proj. na z os.)

tirna vrtilna količina

• spinska vrtilna količina

$\vec{S}_i \rightarrow \vec{S} = \sum_i \vec{S}_i$ $\quad \hat{S}^2 = S(S+1)$, $S_z = m_S$

• L-S sklopitev (sklopitev tir-spin)

$V_{SO} = \lambda \vec{L}\cdot\vec{S}$ → $\vec{L}, \vec{S}$ nista več neodvisna

spin-orbit coupling

$|0\rangle$: fiksiramo n, l - podlupina

$|L\ S\ m_L\ m_S\rangle \longrightarrow \vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$ celotna vrt. kol. $\quad \hat{J}^2 = J(J+1)$, $\hat{J}_z = m_J$

↳ $|L\ S\ J\ m_J\rangle$ so naša nova dobra kvantna števila

$\Rightarrow E_{LSJ}$ (en. bo funkcija L, S in J)

Osnovno stanje atoma?

L, S in J določajo HUNDOVA PRAVILA: so hierarhična ① najmočnejše ⋮

① Osnovno stanje ima največji S, združljiv z Paulijevim izključitvenim načelom.

če vzamemo podlupino z določenim l : N_l $\quad D = 2(2l+1)$ (spin, tirna vrt. k.)

npr. $l = 1$ $\quad p_x \uparrow\downarrow \quad p_y \uparrow\_ \quad p_z \uparrow\_$

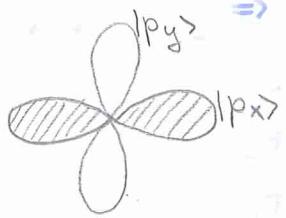
N_l... št. e^- v podlupini : $N_l \leq 2l+1$: S bo max. : $S = \frac{N_l}{2}$

od $N_l = 2l+1$ (polzapolnjena lupina) naprej se spin spet zmanjšuje : $S = 2l+1 - \frac{N_l}{2}$

$S = \max$: $\chi(1, 2, \dots N)$ spinska f. popolnoma simetrična

$\Rightarrow$ posledično mora biti krajevna popolnoma antisimetrična $\phi(\vec{r}_1, \dots \vec{r}_N)$, ima največ vozelnih ct

$\Rightarrow e^-$ so maksimalno narazen



e^- bolj narazen kot če bi bila oba v npr. $|p_x\rangle$.

② Pri danem S ima osnovno stanje največji možni L. (gledaš proj. vrtilne kol.)

↳ posledica Coulombskega odboja

③ $J = |L - S|$ če je $N_l \leq$ polzapolnjena

$J = L + S$ $\quad N_l \geq$ polzapolnjena

λ je odvisen od zapolnjenosti lupine, $\lambda \gtrless 0$

3.11.

Za en atom:

$$\Delta E = -\langle 0|\vec{\mu}\cdot\vec{B}_0|0\rangle + \sum_{m\neq 0}\frac{|\langle m|\vec{\mu}\cdot\vec{B}_0|0\rangle|^2}{E_0^0 - E_0^m} + \frac{e_0^2}{8m}\sum_i \langle \rho_{i\perp}^2\rangle B_0^2$$

vedno obstaja, a je majhen in pride do izraza, ko prvega člena ni

osnovno stanje atoma (iona):

↳ HUNDOVA PRAVILA

$$\hat{\vec{\mu}} = -\mu_B(\hat{\vec{L}} + g_0\hat{\vec{S}}) \qquad \hat{\vec{J}} = \hat{\vec{L}} + \hat{\vec{S}}$$

$$|\underline{L}\ \underline{S}\ \underline{J}\ \underline{J_z}\rangle \qquad H_{LS} = \lambda\vec{L}\vec{S}$$

Ponovitev Hundovih pravil:

1. Največji S skladen s Pauliejevim izključitvenim načelom
2. Največji L, —||— in pravilom 1
3. $J = \begin{cases} |L-S| & N_e \leq \frac{D}{2} = 2l+1 \leftarrow \text{manj ali točno pol zapolnjena lupina} \\ L+S & N_e > \frac{D}{2} = 2l+1 \leftarrow \text{več kot pol zapolnjena lupina} \end{cases}$

Za magnetizem so pomembne orbitale z veliko vrt. kol., blizu jedra (s, p nepomembne)

↳ "grejo v valenco"

d, f orbitale:

d-podlupina: $l = 2$ $\quad D = 2\cdot 5 = 10$

$(2S+1)$ degeneracija L_J

$S = 0$, $J = 2$, $F = 3$

št. e^- N_e	m_e -2	-1	0	1	2	S	$L = \lvert\sum m_e\rvert$	J	oznaka	ioni
1	↑				lahko tudi ↑	$\frac{1}{2}$	2	3/2	$^2D_{3/2}$	Ti^{3+}
2	↑	↑			ipd.	1	3	2	$^3F_2$	V^{3+}
3	↑	↑	↑			$\frac{3}{2}$	3	3/2	$^4F_{3/2}$	Cr^{3+}
4	↑	↑	↑	↑		2	2	0	$^5D_0$	Cr^{2+}
pol-zapolnjena ↳ 5	↑	↑	↑	↑	↑	$\frac{5}{2}$	0	$\frac{5}{2}$	$^6S_{5/2}$	Fe^{3+}, Mn^{2+}
6	↑↓	↑	↑	↑	↑	2	2	4	$^5D_4$	Fe^{2+}
7	↑↓	↑↓	↑	↑	↑	$\frac{3}{2}$	3	9/2	$^4F_{9/2}$	Co^{2+}
8	↑↓	↑↓	↑↓	↑	↑	1	3	4	$^3F_4$	Ni^{2+}
9	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑	$\frac{1}{2}$	2	5/2	$^2D_{5/2}$	Cu^{2+}
10	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	↑↓	0	0	0	$^1S_0$	plemeniti plini

Ti $4s^2\ 3d^2$

f-orbitale pomembne za PREHODNE ELEMENTE (lantanidi & aktinidi)

↳ še boljši magneti: f-orbitale so še bolj lokalizirane

Larmorjev diamagnetizem

$|0\rangle$: $\hat{\vec{\mu}} = -\mu_B(\vec{L} + g_0\vec{S})$

kjer:

$L = S = 0 = J$ $\qquad \hat{\vec{\mu}}|0\rangle = 0$

↳ v tem primeru 1. in 2. člen odpadeta

$$\Delta E = \frac{e_0^2}{8m}\sum_i \langle \rho_{i\perp}^2\rangle B_0^2 = \frac{e_0^2}{8m}\frac{1}{4}\cdot\sum_i\langle r_i^2\rangle B_0^2$$

$$\Delta E = \frac{e_0^2}{12m} Z_i\cdot\langle\tilde{r}^2\rangle\cdot B_0^2$$

← povprečni radij na kvadrat

susceptibilnost?

gost. at. $\qquad$ št. e^- $\qquad$ prispevek 1 atoma

$$\chi = -\frac{N\mu_0}{V}\frac{\partial^2\Delta E}{\partial B_0^2} = -\frac{N}{V}\frac{\mu_0 e_0^2 Z_i\langle\tilde{r}^2\rangle}{6m} = \frac{N}{N_A}\frac{1}{V}\chi_{mol}$$

↳ diamagnetizem $\qquad$ ("Lentzovo pravilo")

$\chi_{dia} \sim -10^{-5}$ (nima enote)

van Vleckov paramagnetizem

$|0\rangle$: $L = S \neq 0$ $\qquad J = 0$ ← ker je

$\langle 0|\vec{\mu}|0\rangle = 0$

↳ 2. in 3. člen "preživita": $\qquad$ člen je 2. | van Vleckov

$$\Delta E_{vV} = \sum_{m\neq 0}\frac{|\langle m|\vec{\mu}\cdot\vec{B}_0|0\rangle|^2}{E_0^0 - E_0^m}$$

vzamemo $\vec{B}_0 = B_0\vec{e}_z$

$$\chi_{vV} = \frac{N\mu_0\mu_B^2}{V}\sum_{m\neq 0}\frac{|\langle m|\overbrace{L_z + g_0 S_z}^{=J\ (\text{ki je } 0)}|0\rangle|^2}{E_0^m - E_0^0} > 0$$

→ paramagnetizem

$\chi_{dia} + \chi_{vV} \gtrless 0$ (odvisno od snovi)

Langevinov paramagnetizem

$$\vec{\mu} = -\mu_B(\vec{L} + g_0\vec{S})$$

$$\langle 0|\vec{\mu}_0\vec{B}_0|0\rangle = -\langle 0|\mu_B(L_z + g_0 S_z)|0\rangle B_0$$

$$\vec{J} = \vec{L} + \vec{S}$$

Landé

↓

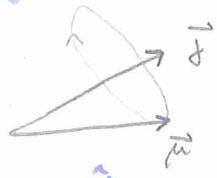
Wigner - Eckartov teorem:

$$\langle LSJJ_z|L_z + g_0 S_z|LSJJ_z'\rangle = \underbrace{g(LSJ)}_{\text{Landé-jev faktor}}\,\underbrace{\langle J_z|J_z|J_z'\rangle}_{\delta_{J_z,J_z'}}$$

$$\langle LSJJ_z|\vec{L} + g_0\vec{S}|LSJJ_z'\rangle = \boxed{\neq f(L_z, S_z, J_z)!}$$

$$= g(LSJ)\,\langle J_z|\vec{J}|J_z'\rangle$$

edina dobra os je os celotne vrtilne kol. J (~ vrtavka)



$$\hat{\vec{L}} + g_0\hat{\vec{S}} \longrightarrow g\cdot\hat{\vec{J}} \quad /\cdot\hat{\vec{J}}$$

nadomestimo z izrazom

$$(\hat{\vec{L}} + 2\hat{\vec{S}})\hat{\vec{J}} = g\cdot\hat{\vec{J}}^2 \longrightarrow g = 1 + \frac{J(J+1) + S(S+1) - L(L+1)}{2J(J+1)}$$

Landéjev faktor oz. g faktor

$$\hat{J}^2 + \hat{\vec{S}}\hat{J} = \hat{J}^2 + \underbrace{\hat{\vec{S}}\hat{\vec{L}}} + \hat{\vec{S}}^2 =$$

$$\hat{S}\hat{L} = \frac{1}{2}\Big(\underbrace{(\hat{L}+\hat{S})}_{J}{}^2 - \hat{S}^2 - \hat{J}^2\Big)$$

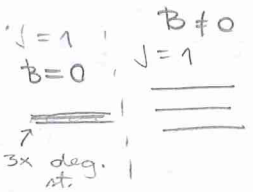
$$\hat{\vec{\mu}} \longrightarrow -\mu_B g\vec{J}$$

Č $J \neq 0$:

$$\Delta E = +\mu_B g J_z B_0 \qquad -J < J_z < J$$

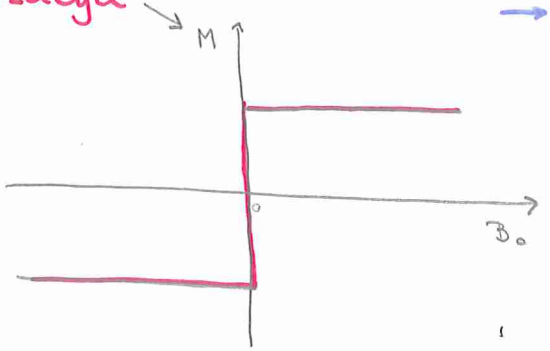
$B_0 \uparrow$

sistem izbere stanje z $-J$, da bo energija najmanjša



↳ **magnetizacija**

pri $T=0$:



$$\longrightarrow \chi \propto \left.\frac{\partial M}{\partial B}\right|_{B=0} = \infty$$

pri $B=0$ ∞ odziv v smeri polja

$$\sum_{n=0}^{m} x^n = \frac{(1-x^{m+1})}{1-x}$$

$T=0$:

$$Z_0 = e^{-\beta F_0} = \sum_{J_z=-J}^{J} e^{-\beta \overbrace{\mu_B g}^{\gamma} B_0 J_z} = \qquad x = e^{-\beta\gamma B_0}$$

$$\Rightarrow \quad Z_0 = \frac{e^{-\beta\gamma B_0(J+1)} - e^{-\beta\gamma B_0 J}}{e^{-\beta\gamma B_0} - 1} = \frac{sh\left(\beta\gamma B_0\left(J+\frac{1}{2}\right)\right)}{sh\left(\beta\gamma \frac{B_0}{2}\right)}$$

$$F_0 = -k_B T \ln Z_0 =$$

μ_J ... max. mag. moment

$$M = -\frac{1}{V}\frac{\partial F}{\partial B_0} = \frac{N}{V}\overbrace{\gamma J}^{\mu_J} B_J(\beta\gamma J B_0)$$

Brillouinova funkcija

$$B_J(x) = \frac{2J+1}{2J}\, cth\left(\frac{2J+1}{2J}x\right) - \frac{1}{2J}\, cth\frac{x}{2J}$$

$J \to \infty$

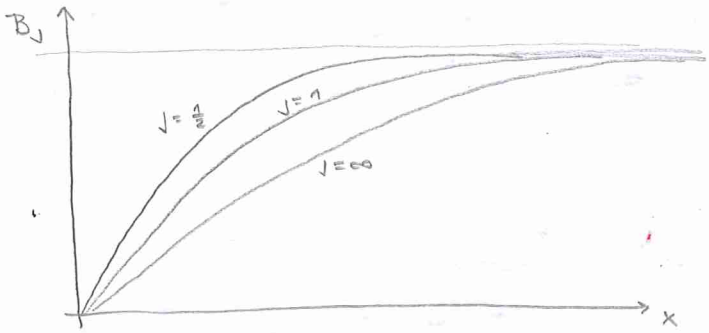
$$\frac{1}{2J}\cdot\frac{2J}{x} = \propto \frac{1}{x}$$

$$B_{1/2}(x) = 2\, cth\, 2x - cth(x)$$

$$B_\infty(x) = cth\, x - \frac{1}{x}$$

~ klasični vektor

$$B_J(x\to\infty) = 1$$



↳ susceptibilnost

$$\chi = \mu_0 \frac{\partial M}{\partial B_0}\Big|_{B_0\to 0}$$

$cth\, x = \frac{1}{x} + \frac{x}{3}$ za majhne x

$$B_J(x\to 0) = \frac{2J+1}{2J}\,\frac{2J}{(2J+1)x} - \frac{2J}{x\,2J} + \left(\frac{2J+1}{2J}\right)^2\frac{x}{3} - \left(\frac{1}{2J}\right)^2\frac{x}{3} =$$

$$= \frac{J+1}{J}\cdot\frac{x}{3}$$

$$\boxed{M_{B_0\to 0} = \frac{N}{V}\gamma^2\frac{J(J+1)\beta}{3}B_0}$$

$$\boxed{\chi = \frac{C}{T}}$$

nekaj

Curiejev zakon

C... Curiejeva konst.

$$C = \frac{N}{V}\gamma^2\frac{J(J+1)}{3k_B}\cancel{\gamma}$$

$$\mu_c = \gamma\sqrt{J(J+1)}$$

χ do reda 1 (pri majhnih T diverglira)

$$C = \frac{N}{V}\frac{\mu_c^2\mu_0}{3k_B}$$

3D

10.11. Ponovitev:

$\chi = \frac{C}{T}$ $\quad C = \frac{n \mu_c^2 \mu_0}{3 k_B}$ $\quad \mu_c = -g(LSJ)\mu_B \sqrt{J(J+1)} = -p\mu_B$

$p = g\sqrt{J(J+1)}$

Curiejev zakon

↳ veljavnost v trdnih snoveh / kristalih

↳ Dobro drži za elemente z f orbitalo, za d orbitale deluje veliko slabše.
(↳ dobro ujemanje če je $L=0$)

• CURIEJEV ZAKON V KRISTALIH

a) f orbitale: ioni redkih zemelj

LSJ: $p = g(LSJ)\sqrt{J(J+1)}$

→ velika vtilna količina ⇒ lokalizirane
⇒ prekrivanje sosednjih atomov je zanemarljivo
(⇒ Curiejev zakon dobro velja)

b) d orbitale: ioni elementov prehoda

→ zamrznitev tirne vtilne količine $L=0$ (⇒ $J=L$)

$g = 2 \rightarrow p = 2\sqrt{S(S+1)}$

→ d-orbitale čutijo "kristalno polje" sosednjih atomov (so manj lokalizirane) ⇒ $L \doteq 0$

→ KRISTALNO POLJE

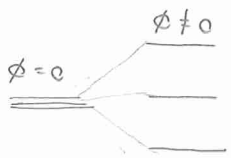
$|L\ L_z\rangle$

→ kristalno polje NIMA sferične simetrije (imamo npr. le kubično)

potencial postane funkcija kotov

$\Delta H_{kp} = e\phi(r, \vartheta, \varphi)$

↳ stanje $L=1$ se v kr. p. razcepi



Primer: p orbitale v ortorombskem kristalu

kvader s 3 razl. stranicami

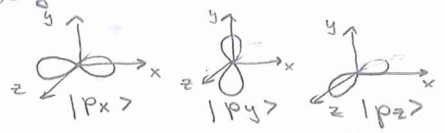
$\nabla^2 \varphi = 0$

Razvijemo potencial:

$A+B \neq A \neq B \rightarrow$ ortorombski

$\varphi = Ax^2 + By^2 - (A+B)z^2$ dobimo nastavek

pri kub. kristalu kvadratni členi niso dovolj (rabimo višji red ali sferične f.)



$L_z = 0$ (simetrična okrog z osi)

$|p_\alpha\rangle = x_\alpha f(r)$ sferično sim. del

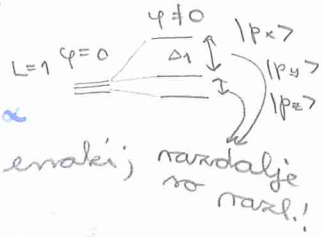
$\alpha = x, y, z$

$|p_z\rangle = z f(r)$

$L_z = i\left(x\frac{\partial}{\partial y} - y\frac{\partial}{\partial x}\right)$ $\hat{L}_z |p_z\rangle = 0$

realne f. gib/vrt. kol. imajo pričakovano vrednost 0

$L_z = 1$: $|p_\pm\rangle = |p_x\rangle \pm i|p_y\rangle$ $x \pm iy = re^{\pm i\varphi}$



$\langle p_\alpha | \Delta H_{kp} | p_\beta \rangle = \delta_{\alpha,\beta} \langle p_\alpha | \Delta H_{kp} | p_\alpha \rangle = \delta_{\alpha\beta} \Delta E_\alpha$

le diagonalni členi, niso pa vsi enaki; razdalje so razl.!

$\rightarrow \langle p_\alpha | L_z | p_\beta \rangle = 0 \rightarrow$ navidez projekcija zamrzne

DN1 d orbitale + kubični kristal $\rightarrow$ delno se razcepi

ΔH_{kp} : ΔH_{LS}

skuša zamrzniti L skuša vzpostaviti vrt. kol.

$\Delta H_{LS} = \lambda \vec{L}\vec{S} = \lambda\left[L^z S^z + \frac{1}{2}(S^+L^- + S^-L^+)\right]$

to lahko zelo natančno izmerimo z resonančnimi metodami

↳ za f-orbitale: $|\Delta H_{LS}| > |\Delta H_{kp}|$

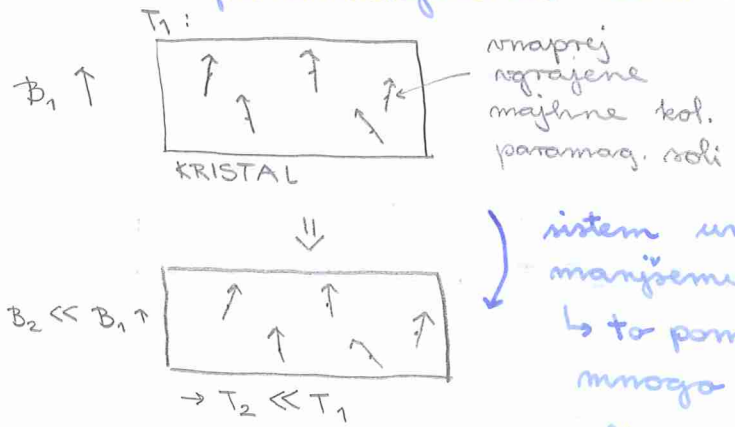
d-orbitale: $|\Delta H_{kp}| > |\Delta H_{LS}| \longrightarrow \langle \psi | \mu_z | \psi \rangle = 2\left(1 - \frac{\lambda}{\Delta_1}\right)$

$s = \frac{1}{2}$ popravek

• ADIABATSKA ~~DIA~~ DEMAGNETIZACIJA
(metoda za hlajenje)

→ za T pod 1K

→ paramagnetne soli



sistem urejen kljub mnogo manjšemu B polju

↳ to pomeni, da je T paramag. sist. mnogo manjša, kot prej

soli se termalizirajo z okolico

⇒ ohladimo kristal

$$S = -\frac{\partial F}{\partial T} = k_B \beta^2 \frac{\partial F}{\partial \beta}$$

$$\beta = \frac{1}{k_B T}$$

↳ magnetni momenti morajo biti neodvisni

$$\beta F = -\ln Z = f(\beta B)$$

$$F = \frac{1}{\beta} f(\beta B)$$

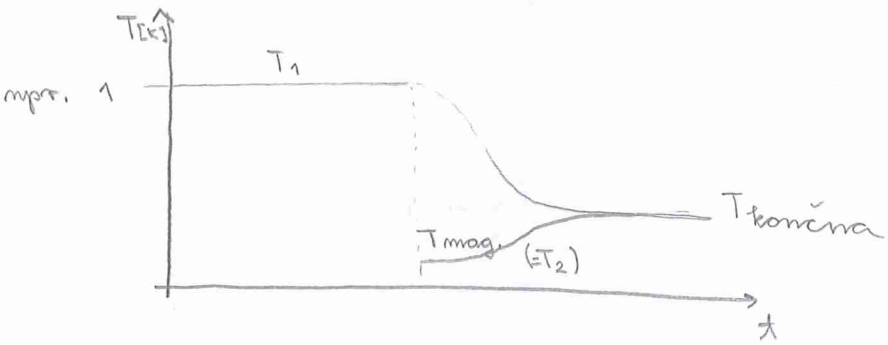
(Radi bi pokazali, da velja: $\frac{B_1}{T_1} = \frac{B_2}{T_2}$)

$$S = k_B \beta^2 \left[-\frac{1}{\beta^2} f + \frac{B}{\beta} f' \right] = k_B \left[-f + \beta B f' \right] = g(\beta B)$$

adiabatska sprememba: $\beta B = \text{konst.}$

$$\boxed{\frac{B_1}{T_1} = \frac{B_2}{T_2}} \longrightarrow T_2 = T_1 \frac{B_2}{B_1}$$

V teoriji $B_2 = 0 \Rightarrow T_2 = 0\,K$. V resnici to ne gre, ker se momenti čutijo med sabo.



* Pri nizkih T, $c_V = \gamma T$ ← e
γT^3 ← m

↳ Demagnetizacija jedrskih spinov / momentov

→ v 2. koraku ponovimo, da se uredijo še spini jeder (bilo so že prej, a imajo toliko manjši mag. moment (1000x manj) da jih opazimo šele pri 2. ponovitvi)

Paulijev paramagnetizem

prevodni elektroni → kakšen je njihov vpliv? Kako gre to skupaj?

kovina = dia / paramagnet

e^- = ima mag. moment $\approx \mu_B$

Pauli, 1927:

→ pokazal, da je edina možnost razlage šibkih mag. last. kovin Paulijevo izključitveno načelo

→ vedeli so že, da ima e^- magnetni moment (ker ima spin)

Naš približek:

spinski prispevek + prosti e^-

$$\Delta H = g_0 \mu_B \vec{S} \cdot \vec{B}_0 = \begin{cases} \mu_B B_0 & s = \frac{1}{2} \quad (1) \\ -\mu_B B_0 & s = -\frac{1}{2} \quad (2) \end{cases}$$

$g_0 = 2$

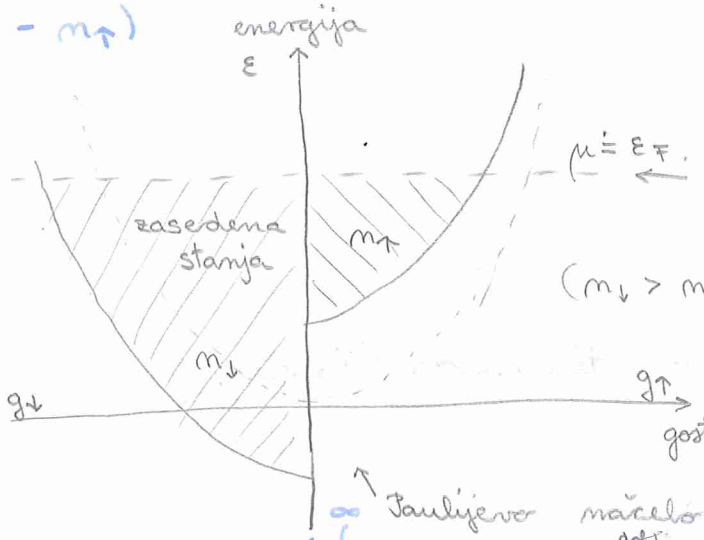
POSLEDICA:

Pojavi se magnetizacija, če pride do razlike zasedenosti stanj (1) in (2)

$$M = \mu_B (n_\downarrow - n_\uparrow)$$

$g(\varepsilon) \propto \sqrt{\varepsilon}$ za proste e^-

za spine ↓ se en. po vklopu B premakne dol →



$\mu \doteq \varepsilon_F$ ← Kemični pot. mora biti enak za ↑ in ↓

$(n_\downarrow > n_\uparrow)$

Paulijevo načelo je tu že upoštevano

$$n_{\downarrow,\uparrow} = \int_{-\infty}^{\infty} d(\varepsilon)\, f(\varepsilon)\, g_{\downarrow,\uparrow} = \frac{1}{2}\int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\, g(\varepsilon \overset{\text{dol}}{\underset{\text{gor}}{\pm}} \mu_B B_0)$$

spin

↓ Fermijeva f.

$$\frac{1}{e^{\beta(\varepsilon-\mu)}+1}$$

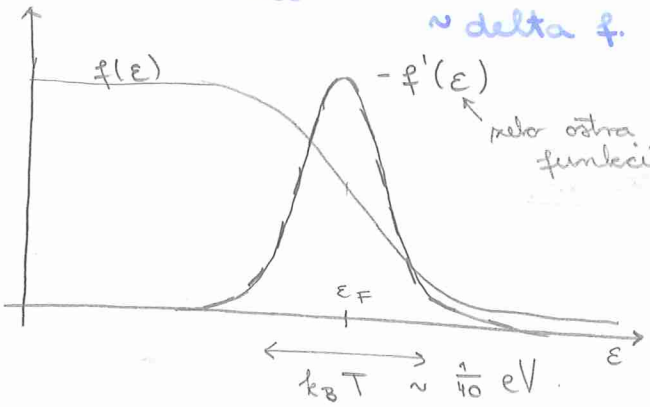
do sem pridemo z razvojem $g(\varepsilon \mp \mu_B B_0)$

pri $\varepsilon = \infty \Rightarrow 0$

$$n_\downarrow - n_\uparrow = \mu_B B_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f(\varepsilon)\, g'(\varepsilon) = \mu_B B_0 \left[\cancel{f(\varepsilon) g(\varepsilon) \Big|_{-\infty}^{\infty}} - \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon\, f'(\varepsilon) g(\varepsilon) \right]$$

$-\infty \qquad 0$

$$M = \mu_B^2 B_0 \int_{-\infty}^{\infty} d\varepsilon \underbrace{\left(-\frac{\partial f}{\partial \varepsilon}\right)}_{\sim \text{ delta f. okrog } \varepsilon_F} g(\varepsilon) = \mu_B^2 B_0\, g(\varepsilon_F)$$



e^- bi bili klasični pri 10000 K

$T_F \sim 10^{3.4}$ K

$k_B T \sim \frac{1}{100}$ eV $\quad \varepsilon_F \sim$ eV

Paulijeva susceptibilnost: $\boxed{\chi_P = \mu_0 \mu_B^2 g(\varepsilon_F)}$ $\quad > 0 \Rightarrow$ paramagnetizem

Primerjava z Curiejevim zakonom? $\chi_{Kl.} = \frac{\mu_0 \mu_B^2 n}{3 k_B T} \gg \frac{\mu_0 \mu_B^2 n}{\varepsilon_F}$

$\frac{n}{\varepsilon_F} \approx g(\varepsilon_F)$

↳ Elektroni zelo malo prispevajo:

$$\chi_P \ll \chi_{Kl.}$$

V izpeljavi zahtevamo le, da so e^- med seboj neodvisni (med njimi ni Coulombske interakcije)

(v resnici seveda se)

$$\chi_P = \frac{2{,}59}{\tilde{r}_s} \cdot 10^{-6}$$

čutija

Prispevek tirnega gibanja:

Landau-ov diamagnetizem

$$\chi_L = -\frac{1}{3} \chi_P \left(\frac{m}{m^*}\right)^2$$

m: masa prostega e^-

m^*: efektivna masa e^- (v teoriji pasov

• Prispevek tirnega gibanja: Landau-ov diamagnetizem

$$\chi_L = -\frac{1}{3}\chi_P \left(\frac{m}{m^*}\right)^2$$

m ← masa prostega e^-

m^* ← efektivna masa e^- (v teoriji pasov)

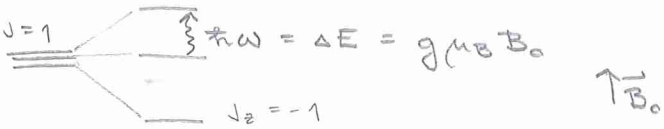
Merjenje magnetnih momentov

RESONANČNE METODE

A) EPR (elektronska paramagnetna resonanca)

nerodvisni magnetni momenti; ioni: 3d, 4f (za ione)

$\Delta H = \pm g \mu_B \vec{J} \cdot \vec{B}$ ← elektron je neg. nabit; ↑ teorija



→ gledamo absorpcijo svetlobe (mikrovalov)

B) NMR (jedrska mag. resonanca) → za kovinske e^-; če nas npr. zanima χ_P

↳ KNIGHTOV premik (jedro je + nabito)

- $\Delta H = -\gamma_N \vec{I} \cdot \vec{B}_0$ $\quad \gamma_N \sim \mu_B \cdot 10^{-3}$

  jedrska orbitalna kol. le moment jedra!

Kje so torej prevodni elektroni?

- prevodni e^-:

s orbitala

Če verjetnost da se nahaja na mestu jedra $\neq 0$ pride do t.i. KONTAKTNE / FERMIJEVE sklopitve

$H' = -\alpha \vec{\mu}_e \vec{\mu}_N$

α: $|\psi(0)|^2 \mu_0$; $\vec{\mu}_e$: e^-; $\vec{\mu}_N$: nevtron

le e^- s-orbitale! ostali imajo $\psi(0) = 0$

Če damo takoj nov v polje:

$\Delta H = (\vec{B}_0 - \alpha g \mu_B \vec{B}_0 \chi_P) \gamma_N \vec{I}$ ⇒

$\langle \vec{\mu}_e \rangle = -g_0 \mu_B \langle \vec{S} \rangle$ ← $\propto \chi$

$\mu_0 M = n g \mu_B \langle \vec{S} \rangle$

n: gostota momentov

$\Delta H = (1 + K) \gamma_N \vec{I} \vec{B}_0$

K: Knightov premik

$K = \frac{\alpha \chi_P}{\mu_0 n} = \xi \chi_P$

$\xi = \frac{|\psi(0)|^2}{n} = 0{,}44$ (tipično)

→ resonanco lahko merimo na 6 mest natančno

Če želimo razložiti kolektivne magnetne pojave, moramo najprej razumeti pojem

Magnetna sklopitev

$T < T_c$: urejene magnetne strukture
(feromagnetizem, antiferomag., ...)

~~Kaznego začnemo s predpostavk~~

Obstoj lokalnih momentov 

(morajo pa biti res lokalizirani!)

IZVOR sklopitve:

a) DIPOLNA INTERAKCIJA

$$U = \mu_0 \frac{1}{r^3}\left[\vec{\mu}_1 \cdot \vec{\mu}_2 - \frac{3(\vec{\mu}_1 \cdot \vec{r})(\vec{\mu}_2 \cdot \vec{r})}{r^2}\right]$$

$(\mu_1, \mu_2 \sim \mu_B)$

$$U \sim \frac{\mu_0 \mu_B^2}{r^3} < 10^{-4}\,eV$$

$r > 2Å$

← Če to primerjamo s $k_B T_c$ → vidimo, da bi bil T_c pod 1K

↓

Ta int. NE razloži visokotemp. feromagnetizma:

→ premajhna sklopitev
→ anizotropna

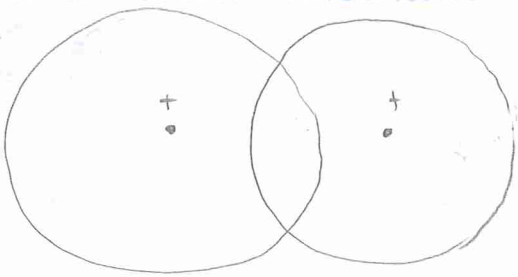
(posledica dipolne int. je domenska struktura feromagnetov)

b) IZMENJALNA INTERAKCIJA

→ kvanten efekt

→ za vzorec bomo vzeli molekulo H_2

$N_e = 2$



→ Izmenjalna int. je posledica Coulombskega odboja med elektroni in Pauliijevega izključitvenega načela

$\hat{H}\psi = E\psi$, rela val. f. bo f. tako koordinat

$\hat{H} = \hat{H}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) \neq \hat{H}(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$ kot spina: biti mora ANTISIMETRIČNA na zamenjavo delcev

$\Downarrow$

ψ bo le krajevni del ϕ

$$\phi(\vec{r}_1, \vec{s}_1, \vec{r}_2, \vec{s}_2) = -\phi(\vec{r}_2, \vec{s}_2, \vec{r}_1, \vec{s}_1)$$

$$\phi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, \chi(\vec{s}_1, \vec{s}_2)$$

velika energijska razlika

E_s: $\psi_s \rightarrow \chi_a$ krajevna simetrična $\Rightarrow$ spinska antisimetrična

E_a: $\psi_a \rightarrow \chi_s$ oz. obratno

možnosti za spin: $|\downarrow\uparrow\rangle$, $|\uparrow\downarrow\rangle$, $|\uparrow\uparrow\rangle$, $|\downarrow\downarrow\rangle$

$\chi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ singlet $s = 0$

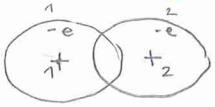
$$\chi_s = \left.\begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \\ |\downarrow\downarrow\rangle \end{cases}\right\} \text{triplet} \quad \left.\begin{matrix} s_z = 1 \\ s_z = 0 \\ s_z = -1 \end{matrix}\right\} s = 1$$

IZMENJALNA INTERAKCIJA $\rightarrow$ PONOVITEV

17.11.

$\rightarrow$ Paulijevo izklj. načelo + Coulombski odboj

$\rightarrow$ H_2



$$H = -\frac{\hbar^2}{2m}(\nabla_1^2 + \nabla_2^2) + V(\vec{r}_1, \vec{r}_2)$$

$$V(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = U(\vec{r}_1) + U(\vec{r}_2) + \frac{e^2}{4\pi\varepsilon_0 |\vec{r}_1 - \vec{r}_2|}$$

$$\phi(\vec{r}_1, s_1; \vec{r}_2, s_2) = -\phi(\vec{r}_2, s_2; \vec{r}_1, s_1)$$

$$\phi = \psi\chi = \psi(\vec{r}_1, \vec{r}_2)\, \chi(s_1, s_2)$$

lastna stanja:

$$\phi = \begin{cases} \psi_s \chi_a \; ; \; E_s \\ \psi_a \chi_s \; ; \; E_a \end{cases}$$

$\chi_a = \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle)$ $s = 0$ E_s

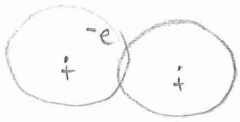
$$\chi_s = \begin{cases} |\uparrow\uparrow\rangle \rightarrow s_z = 1 \\ \frac{1}{\sqrt{2}}(|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle) \rightarrow s_z = 0 \\ |\downarrow\downarrow\rangle \rightarrow s_z = -1 \end{cases} \quad s = 1 \quad E_a$$

razlika teh en. pomeni, da dobimo magnetno interakcijo, spini se bodo uredili tako, da bomo imeli stanje z nižjo energijo

PRIBLIŽKI

a) neodvisni elektroni : MO

$\varphi_1(\vec{r}), \quad \varphi_2(\vec{r})$



$H_2^+ : \quad \varphi_{s,a}(\vec{r}) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1(\vec{r}) \pm \varphi_2(\vec{r})\right]$

$H_2 : (2e^-)$

$$\psi_s(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \varphi_s(\vec{r}_1)\,\varphi_s(\vec{r}_2) =$$

$$= \underset{\alpha > \frac{1}{2}}{\frac{1}{2}}\underbrace{\left[\varphi_1(\vec{r}_1)\,\varphi_2(\vec{r}_2) + \varphi_2(\vec{r}_1)\,\varphi_1(\vec{r}_2)\right]}_{e^- \text{ na razl. atomih}} + \underset{\beta < \frac{1}{2}}{\frac{1}{2}}\overbrace{\left[\varphi_1(\vec{r}_1)\,\varphi_1(\vec{r}_2) + \varphi_2(\vec{r}_1)\,\varphi_2(\vec{r}_2)\right]}^{\text{oba na istem}}$$

To je točno, če ni Coulombskega odboja.

Lotimo se variacijsko ; povečamo 1. parameter in zmanjšamo 2.

$\beta = 0$: Heitler - Londonov približek → se uporablja v magnetizmu (ker poleg osnovnega pove še 1. vzbujeno stanje)

$\alpha = \frac{1}{\sqrt{2}}$

↳ Približek je ok, če prekrivanje ni preveliko.

b) HL PRIBLIŽEK :

$$\psi_{s,a}(\vec{r}_1, \vec{r}_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\varphi_1(\vec{r}_1)\,\varphi_2(\vec{r}_2) \pm \varphi_2(\vec{r}_1)\,\varphi_1(\vec{r}_2)\right]$$

simetrična na menjavo delcev

antisimetrična

↳ Izračunamo lahko razliko energij simetričnega in antisimetričnega stanja.

$$E_s - E_a = \langle\psi_s|H|\psi_s\rangle - \langle\psi_a|H|\psi_a\rangle =$$

če se f. ne prekrivajo bo integral $\emptyset$

$$\boxed{= 2\iint d\vec{r}_1\, d\vec{r}_2\; \varphi_1^*(\vec{r}_1)\,\varphi_2^*(\vec{r}_2)\,\underbrace{H(\vec{r}_1, \vec{r}_2)}_{\text{pomemben prispevek } V}\,\varphi_1(\vec{r}_2)\,\varphi_2(\vec{r}_1) = J}$$

izmenjalni / exchange integral

$J \neq 0$: prekrivanje valovnih funkcij

$J(d)$ ← J bo zelo odvisen od razdalje med jedroma (d)

Za feromagnetizem je $J > 0$.

• H_2: $E_s < E_a \rightarrow J < 0 \Leftarrow$ antiferomagnetna sklopitev

c) SPINSKA SKLOPITEV

$$E = \begin{cases} E_s & ; \quad s = 0 \\ E_a & ; \quad s = 1 \end{cases}$$

$E = E_s - JS$ → s = dobro kvantno št.; S bi radi zapisali kot interakcijo med spinoma.

$$\hat{H} = E_s - J\frac{s(s+1)}{2} = E_s - \frac{J}{2}\hat{S}^2 = \qquad s_1, s_2 = \frac{1}{2}$$

$$= E_s - \frac{J}{2}(\hat{S}_1 + \hat{S}_2)^2 = E_s - \frac{J}{2}(\underbrace{\hat{S}_1^2}_{\frac{s_1(s_1+1)}{3/4}} + \underbrace{\hat{S}_2^2}_{3/4} + 2\hat{S}_1 \cdot \hat{S}_2)$$

$J = E_s - E_a$

$$= \underbrace{E_s - \frac{3}{4}J}_{\frac{3E_a + E_s}{4}} - J\hat{S}_1\hat{S}_2$$

= neke vrste povprečna energija

$\hat{H} = E - J\hat{S}_1\hat{S}_2$ → skalarni produkt, odvisen od kota med S_1 in S_2

efektivna interakcija med lokalnimi mag. momenti

Za razliko od dipolne je odvisna le od kota med spini ⇒ izotropna v spinskem prostoru

* Dipolna: $\left[\vec{\mu}_1\vec{\mu}_2 - \frac{3(\mu_1\vec{r})(\mu_2\vec{r})}{2}\right]$? poglej nazaj!

↑ po celem prostoru se izpovpreči v $\emptyset$.

Lastnosti

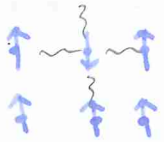
• odvisna le od rel. "kota" med spini $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}$

• močna sklopitev $J \approx 10^{-1}$ eV

d) HEISENBERGOV MODEL

→ 1. kvanten model
več delcev ; rešen v 1D

Posplošitev na mrežo atomov (celic)



$s = 1/2$

možnih stanj: $(2s+1)^N$

(velika degeneracija!)

Degeneracijo odpravlja sklopitev:

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} S_i S_j = -\frac{J}{2} \sum_{(ij)} \vec{S}_i \vec{S}_j$$ ← izotropni H.M.

$\langle ij \rangle$: pari najbližjih sosedov

(ij): vsi pari

- sklopitev med najbližjimi sosedi
- izotropnost v spinskem prostoru

Predpostavili smo:

- da imamo 1 e^- na celico (2. bi imel zaradi Coulombskega odboja prevelico energijo)
  - ↳ polzapolnjen pas
  - ↳ magnetni izolator
  - ↳ močne korelacije (strong correlations)

POSPLOŠITEV

← mreža ni nujno kubična

$$H = -\sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

J_{ij} ← f. razdalje

e) ANIZOTROPNI MODELI

$L \neq 0$, $S > \frac{1}{2}$ ⟶ $\vec{J}$

⇓

Pojavi se anizotropija.

$J > \frac{1}{2}$ ⇒ kristalno polje povzroči, da smeri v kristalu niso več ekvivalentne

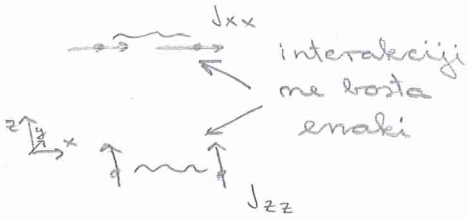
↓

$S > \frac{1}{2}$

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{i,j} J_{ij}^{\alpha\alpha} \underbrace{S_i^\alpha S_j^\alpha}$$

učinkuje le najbližji sosedje

postane odvisno od smeri



$J_{ij}^{xx} \neq J_{ij}^{zz}$ → ni odvisno le od relativne smeri spinov ampak tudi od usmerjenosti v prostoru.

Skrajni primer → vzamimo npr. le interakcijo v smeri z

$$\boxed{H = -J\sum_{\langle ij\rangle} S_i^z S_j^z}$$

največkrat obravnavan model statistične fizike

ISINGOV MODEL (klasičen model) ⇒ $H = -J\sum_{\langle ij\rangle} \sigma_i^z \sigma_j^z$

Vrnimo se nazaj.

Do sedaj smo obravnavali ti. direct exchange. Osnova je direktno prekrivanje sosednih orital.

1. DIREKTNO prekrivanje orital: ↑ ↓ ↑ ↓ ↑ ← Direktna izmenjava

2. ↑ ↓ ↑ SUPERIZMENJAVA (preko nemagnetnih ionov, posredniki)

3. INDIREKTNA IZMENJAVA ↑ ↓ ↑ izmenjava preko nelokalnih atomov v d, f oritalah.

4. INTINERANTNA IZMENJAVA; izmenjava preko nelokaliziranih prevodnih e⁻ ↑ ↑ ↓ ↑ ↓

• Magnetne strukture

$$H = -J\sum \vec{S}_i \vec{S}_j$$

("bottom up pristop) (največkrat reševan kvantni problem več delcev)

• $J > 0$ ↑ ↑ ↑ ↑ feromagnet $M(H=0, T<T_c) \neq 0$

↳ spontana magnetizacija

• $J < 0$ ↑ ↓ ↑ ↓ antiferomagnet

definiramo ti. podmrežo

Če so urejeni v isto smer dobimo

$N(H=0, T<T_c) \neq 0$

↳ spontana podmrežna magnetizacija

- ferimagnet $\uparrow\downarrow\uparrow\downarrow\uparrow$ → ima spontano magnetizacijo
- spiralne strukture ...

I. Feromagnetizem

P. Curie, Weiss

- Weissovo molekularno polje

$$\vec{B}^{ef} = \vec{B}_0 + \underbrace{\lambda \vec{M}}_{\text{polje zaradi magnetizacije v snovi}}$$

$$\mu_0 \vec{M} = \chi_0 \vec{B}^{ef} \qquad \chi_0 = \frac{C}{T}$$

$$\mu_0 \vec{M} = \chi_0 (\vec{B}_0 + \mu_0 \lambda \vec{M})$$

$$\mu_0 \vec{M} = \frac{\chi_0}{1 - \lambda \chi_0} \vec{B}_0 = \chi \vec{B}_0$$

$$\chi = \frac{1}{\chi_0^{-1} - 1 \cdot \lambda} = \frac{C}{T - T_c}$$

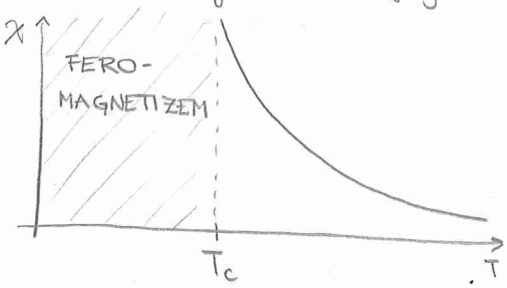
kritična / Curiejeva temp.

$$T_c = \lambda \cdot C$$

$$\lambda = \frac{T_c}{C} \sim 1000$$ ← daleč od klasičnih teorij → izvor: v QM.

$$\boxed{\chi = \frac{C}{T - T_c}}$$ Curie-Weissov zakon

pri T_c divergira ⇒ pojavi se feromagnetizem



$T < T_c$:

$$M_0 = M(B = 0) \neq 0$$

	Fe	Co	Ni	Dy	EuS
T_c [K]	1043	1388	627	85	16,5
$\mu_0 M_0$ [T]	0,17	0,14	0,06	0,3	0,11

← idealni izotropni feromagnet; deluje prek superexchangea

↓

• Približek povprečnega polja (mean field aproximation) = MFA

$$H = -J\sum_{\langle ij\rangle} \vec{S}_i\vec{S}_j + \underbrace{g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \vec{B}_0}_{\text{vpliv zunanjega polja}}$$

Radi bi napisali:

$\vec{S}_i$: $H_{MF} = g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \vec{B}_i^{ef}$ $\qquad \vec{B}_i^{ef} = ?$

$$\vec{B}_i^{ef} = \left\langle \frac{\partial H}{g\mu_B \partial S_i} \right\rangle = B_0 - \frac{J}{g\mu_B} \sum_{j \text{ n.s. } i} \langle \vec{S}_j \rangle$$

statistično povprečje

najbližji sosedi okrog i; z ... št. najbližjih sosedov

$\langle \vec{S}_i \rangle = -\vec{S} \parallel \vec{B}_0$

da bo v smeri magnetizacije

povsod enak

za mean field je dobro, da je z čim večji

$$\vec{B}^{ef} = \vec{B}_0 + \frac{Jz\vec{S}}{g\mu_B}$$

$$\vec{M} = \frac{N}{V} g\mu_B \vec{S}$$

$$\vec{B}^{ef} = \vec{B}_0 + \mu_0 \lambda \vec{M}$$

$$\lambda = \frac{JzV}{N g^2 \mu_B^2 \mu_0}$$

$S = 1/2$: $g = 2$

$$H_{MF} = g\mu_B \sum_i \vec{S}_i \vec{B}^{ef}$$

$$\langle s_i \rangle = \langle S \rangle = s = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\beta \mu_B \cancel{g} B^{ef}}{\cancel{2}}$$

utež za spin ↑ oz. ↓ v zun. polju

ce. polja ni : $\vec{B}_0 = 0$: $s = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\beta J z s}{2}$ ← pričakovana vrednost spina

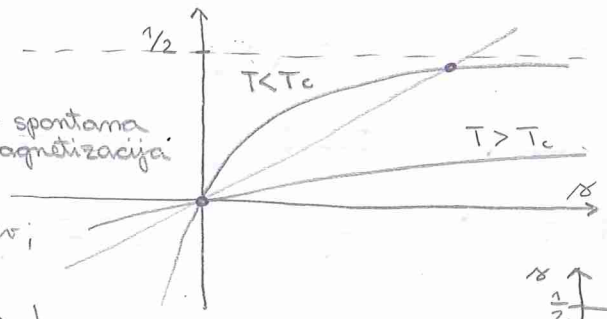
Netrivialne rešitve?

$T > T_c$: $s = 0$

$T < T_c$: $s \neq 0$

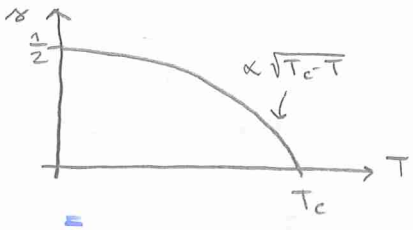
stabilna rešitev; $s = 0$ ni!

$M \propto s$ = spontana magnetizacija



$$\frac{1}{2} \frac{\beta_c J z}{2} = 1$$

$$\hookrightarrow k_B T_c = \frac{Jz}{4} \quad J_0$$



Obnašanje rešitve:

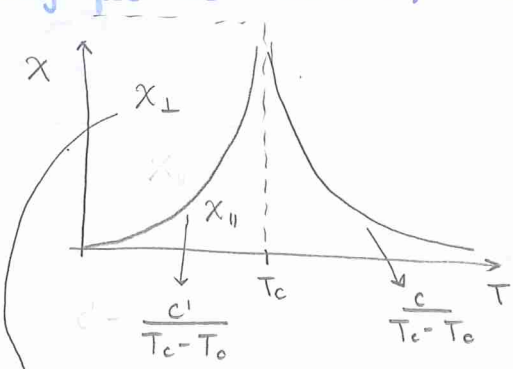
$$2s = \operatorname{th} x = x - \frac{x^3}{3} + \dots = \frac{\beta J_0 s}{2} - \frac{1}{3}\left(\frac{\beta J_0 s}{2}\right)^3 + \dots =$$

$$1 = \frac{\beta J_0}{4} - \frac{1}{6}\frac{(\beta J_0)^3}{8} s^2 \longrightarrow$$ s se v bližini kritične točke obnaša korensko $s \propto \sqrt{T_c - T}$

$\Rightarrow s \propto \sqrt{T_c - T}$

(v bližini T_c)

Kaj pa če $B_0 \neq 0$, $B_0 \to 0$?



susceptibilnost pri $T<T_c$:

$$\chi_{\parallel} = \frac{\partial M_{\parallel}}{\partial B_0}\mu_0$$

$$\chi_{\perp} = \frac{\partial M_{\perp}}{\partial B_0}\mu_0$$ ← pravokotna magnetizacija ($\chi_{\perp} \to \infty$) → v resnosti končen

Problem teorije: vedno dobiš nek rezultat, a ni nujno prav.

✓ teorija da fazni prehod II. reda (ti. zvezni fazni prehod) → ni latentne toplote

problematično je predvsem obnašanje v bližini kritične točke:

→ količine so zvezne pri $T=T_c$

→ singularne!

→ veljajo potenčni zakoni ti. power law

→ kritični eksponenti

- Kritično obnašanje

zvezni
- fazni prehod II. reda
  ⇒ ni latentne toplote
- količine v $T=T_c$ zvezne
- definiramo potenčne zakone, vpeljemo kritične eksponente
- $M = (T_c - T)^{\beta}$ za $T<T_c$

  $\chi = (T-T_c)^{-\gamma}$ za $T>T_c$; $(T_c - T)^{-\gamma'}$ $T<T_c$

  $c_V = (T-T_c)^{\alpha}$ $T>T_c$; $c_V = (T_c - T_0)^{-\alpha'}$ $T<T_c$

Klasični kritični eksponenti (v približku povp. polja):

MFA: $\beta = 1/2$, $\gamma = \gamma' = 1$, $\alpha = \alpha' = 0$

Eksperimentalno

Fe: $\beta = 0{,}35$; $\gamma = 1{,}33$

Teorija povp. polja NI TOČNA

24. 11.

MFA: $\beta = \frac{1}{2}$, $\gamma = 1$, $\alpha = 0$

Univerzalnost kritičnega obnašanja je posledica skalne invariantnosti pri $T = T_c$. (lin / potenčna f.)

↳ eksponenti so neodvisni od parametrov (α, β, γ enaki ne glede na T_c)

↳ odvisni so od dimenzije sistema ... d (je Fe naparjen (⇒ tanka plast) ali gre za večji kristal) in ureditvenega parametra D (dimenzija UP).

ureditveni parameter : $M_s(T > T_c) = 0$

(teorija renormalizacijske grupe (RG)) ← 1. je to uspel pokazati K. Wilson

↳ vpeljal je ti. razvoj $\varepsilon = 4 - d$ (razvija okrog 4 dim.)

Fe: ($d = 3$, $D = 3$) rezultati simulacij: $\beta \approx \frac{1}{3}$, $\gamma = \frac{4}{3}$

2D Isingov model: (Onsager) → rešil termodinamsko rotor

spin ↓↑ → $d = 2$, $D = 1$

točna rešitev: $\operatorname{sh} \frac{\beta_c J}{2} = 1$ $\quad \beta_c = \frac{1}{k_B T}$

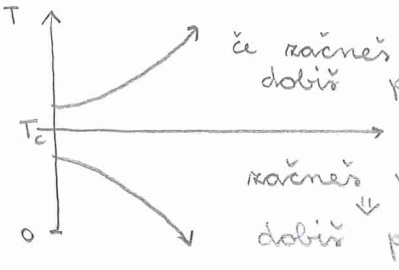
↳ kasneje so iz tega izračunali kritične eksponente

$\beta = \frac{1}{8}$, $\gamma = \frac{7}{4}$ (Onsager rešil in napisal na tablo na konferenci brez razlage ☺)

model: $E = J \sum_{\langle ij \rangle} \sigma_i \sigma_j$; $\sigma_i = \pm 1$

dtjohnson.net

$Z = \operatorname{tr}(e^{-\beta E})$



če začneš simulacijo nad T_c dobiš popolnoma naključne spine (kar ustreza ∞ T_c)

začneš pod T_c
⇓
dobiš popolnoma urejeno stanje

Približek povprečnega polja da sicer napačne vrednosti eksponentov, dobimo pa fazni prehod, kar je naredi netrivialno!

II. Antiferomagnetizem

$J < 0$; $H = J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j$ $\quad s = 1/2$

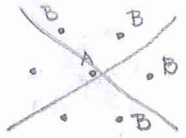
← kvadratna mreža → ti. NEFRUSTRIRANA

$i \in A$, B podmreža — najbližji sosedi od A so B in obratno

(to ne gre na npr. trikotni)

- ti. FRUSTRIRANE MREŽE

npr.: trikotna, fcc



← to ne gre ⇒ situacija je bolj komplicirana

- NEFRUSTRIRANE mreže

- pod neko temperaturo $T < T_N$ ← Néel se pojavi spontana magnetizacija: $M_A = -M_B \neq 0$
- Navzven je celotna magnetizacija 0.

$$M = M_A + M_B = 0$$

↳ uporabimo PRIBLIŽEK POVPREČNEGA POLJA (MFA):

(podobno kot feromagnetizem)

$$\vec{B}^{ef}_{A,B} = \vec{B}_0 - \mu_0 \lambda \vec{M}_{B,A} \qquad \lambda = \frac{z|J|}{\underbrace{g^2 \mu_B^2}_{(\text{moment elektr.})^2}} \frac{V}{\mu_0 N} \quad (\lambda > 0)$$

označimo: $z|J| = |J_0|$

$s = 1/2$:

$$\vec{M}_{A,B} = -\frac{N}{V} g \mu_B \vec{\sigma}_{A,B}$$

upoštevali smo $g = 2$

$T > 0$: $\sigma_{A,B} = \frac{1}{2} \tanh\left(\beta B^{ef}_{A,B} \mu_B\right)$

$B_0 = 0$: $\sigma_{A,B} = -\frac{1}{2} \tanh \beta \frac{|J_0|}{2} \sigma_{B,A}$

uporabimo: $\sigma_A = -\sigma_B = \sigma \Rightarrow \boxed{\sigma = \frac{1}{2} \operatorname{th} \frac{\beta |J_0|}{2} \sigma}$

Rešitev bo obstajala za $k_B T_c = \frac{|J_0|}{4} = \frac{z|J|}{4}$

Pod kritično temp. $T < T_c$: $\sigma \propto (T_c - T)^{1/2}$

$M = M_A + M_B = 0 \rightarrow M_A \propto \sigma_A \propto (T_c - T)^{1/2}$

podmrežna spontana magnetizacija

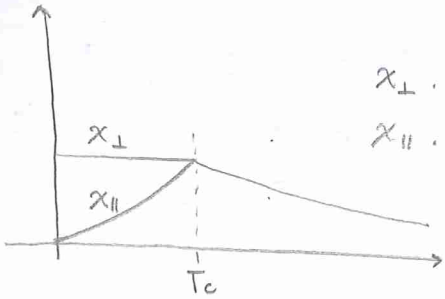
Če zunanje polje ni nič; $B_0 \neq 0$: $T > T_c$

$$\mu_0 M_A = \chi_0 B_A^{ef} = \chi_0 (B_0 - \mu_0 \lambda M_B)$$

$$\mu_0 M_B = \chi_0 B_B^{ef} = \chi_0 (B_0 - \mu_0 \lambda M_A)$$

susceptibilnost: $\chi = \frac{\mu_0 M}{B_0} = \frac{\mu_0 (M_A + M_B)}{B_0} = \frac{\chi_0}{1 + \lambda \chi_0} = \frac{C}{T + \underbrace{\lambda C}_{T_c}}$

$$\boxed{\chi = \frac{C}{T + T_c}}$$ — ne divergira pri prehodu



$\chi_\perp$ ... polje $\perp$ na smer ureditve

$\chi_\parallel$ ... $\uparrow\downarrow\uparrow$ $\uparrow \vec{B}_0$

$\xrightarrow{\vec{B}_0}$

pretirano narisano: kot med $\uparrow$ in $\downarrow$ mora ostati $\sim 180°$!

	MnO	NiO	VS	La_2CuO_4
T_c (K)	122	600	1040	300

(lantanov kuprat) → če ga dopiraš s stroncijem dobiš superprevodnik

III. Upazovanje magnetnih struktur

- FEROMAGNETIZEM:
  - spontana magnetizacija pod $T_c \neq 0$; $M_s(T < T_c) \neq 0$
  - makroskopski magnetni moment
  - histereza (več v nadaljevanju)

- ANTIFEROMAGNETIZEM:
  - ni spontane magnetizacije ($M_s = 0$)
  - $\chi(T = T_c)$ ima nezvezen odvod
  - sipanje termičnih nevtronov: statične in dinamične lastnosti
    - $\longrightarrow kT \sim \frac{1}{40}$ eV
    - nevtron ima mag. moment μ_N
    - sipljejo se na urejenih magnetnih strukturah
    - elastično sipanje da info o statični strukturi ($T < T_c$ Braggov odboj)
    - večja celica → manjša B.C. → več odbojev (dodatni vrhovi) (nevtronov!)

(termične n° se uporablja tudi za preiskovanje mežnih nihanj; fajn je da ima preiskovalec (n°) enako en. kot preiskovanec)

- NMR → zaznamo spremembo lokalnega polja

Iz okolice T_c se bomo preselili proti 0K.

Osnovno stanje spinskih sistemov

• IZOTROPNI HEISENBERGOV MODEL (IHM)

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j$$

(za 36 mest: $10^9 \times 10^9$ matrika)

za $S = 1/2$

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = S_i^z S_j^z + (S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)$$

$$\vec{S} = (S^x, S^y, S^z) \longrightarrow (S^z, S^+, S^-)$$

$S^z|\uparrow\rangle = \frac{1}{2}|\downarrow\rangle$, $S^z|\downarrow\rangle = -\frac{1}{2}|\downarrow\rangle$

$S^+|\uparrow\rangle = 0$

$S^+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle$

Dobra kvantna števila?

→ celotni spin $\vec{S}_{tot} = \sum_i \vec{S}_i$

$[H, S^z_{tot}] = 0$ (komponente spina NE komutirajo med sabo, običajno vzamemo S^z_{tot})

→ $[H, S^2_{tot}] = 0$

→ FM

feromagnet

$$|\psi_0\rangle = \prod_i |i\uparrow\rangle$$

$$H|\psi_0\rangle = E|\psi_0\rangle \Rightarrow -J \frac{N \cdot z}{2} = \frac{JNz}{8} = E_0$$

vsako mesto ima z sosedov

ker smo vsak par šteli 2x

To očitno ni edino osnovno stanje; lahko bi vsi spini kazali dol.

$S^z_{tot} = \frac{N}{2} \longrightarrow S_{tot} = \frac{N}{2}$ ← takih stanj je:

$$D = 2S_{tot} + 1 = N + 1$$

degeneracija

Poleg teh 2 lahko z uporabo S^- dobimo še 3 vmesna stanja.

⇒ N+1 osnovnih stanj

→ AFM

$$|\tilde{\psi}_0\rangle = \prod_{i \in A} |i\uparrow\rangle \prod_{j \in B} |j\downarrow\rangle$$

⇒ izkaže se, da $|\tilde{\psi}_0\rangle$ ni lastno stanje H

$$H|\tilde{\psi}_0\rangle \neq E_0|\tilde{\psi}_0\rangle$$

$$\vec{S}_i \vec{S}_j = \underbrace{S_i^z S_j^z}_{\text{ni problematičen}} + \frac{1}{2}\underbrace{(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+)}_{\text{obračalni členi (spin-flip)}}$$

→ stanje se spremeni, $|\tilde{\psi}_0\rangle$ ni lastna funkcija

→ v splošnem osnovno stanje ni analitično določljivo (točne rešitve ni)

→ Da se v 1D: $d=1$ (H. Bethe); (pristop Bethe Ansatz) (dobimo točne, netrivialne rešitve)

→ Za razliko od FM dobimo 1 rešitev; $S_{tot} = 0$ če ima veriga sodo členov (stanje ni degenerirano)

Vzbujena stanja spinskih sistemov

→ FM

$\uparrow \uparrow \cdots \underset{i}{\downarrow} \cdots \uparrow \uparrow$ $\quad |\varphi_i\rangle = S_i^- |\psi_0\rangle$ ← na i-tem mestu obrnem spin

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) \right]$$

$$H|\varphi_i\rangle = \left(E_0 + \frac{zJ}{2}\right)|\varphi_i\rangle - \frac{J}{2} \sum_{j \text{ n.s. } i} |\varphi_j\rangle \Rightarrow |\varphi_i\rangle \text{ ni lastna funkcija}$$

Splošen trik za iskanje lastnega stanja (Blochov teorem)

nastavek: $|\psi_{\vec{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\vec{k}\vec{R}_i} |\varphi_i\rangle$

(dela za translacijsko simetrične funkcije)

$$H|\psi_{\vec{k}}\rangle = (E_0 + \varepsilon_{\vec{k}})|\psi_{\vec{k}}\rangle$$

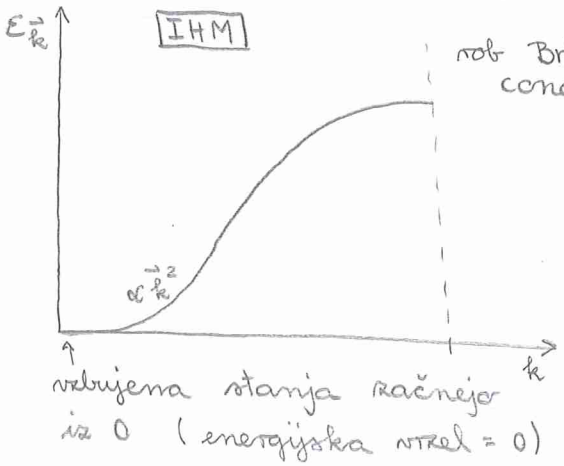
$$\varepsilon_{\vec{k}} = \frac{zJ}{2} - \frac{J}{2} \underbrace{\sum_{j \text{ n.s. } 0} e^{i\vec{k}\vec{R}_j}}_{\text{sosedov je } z} = \frac{zJ}{2} \sum_{j \text{ n.s. } 0} \left(1 - e^{i\vec{k}\vec{R}_j}\right)$$

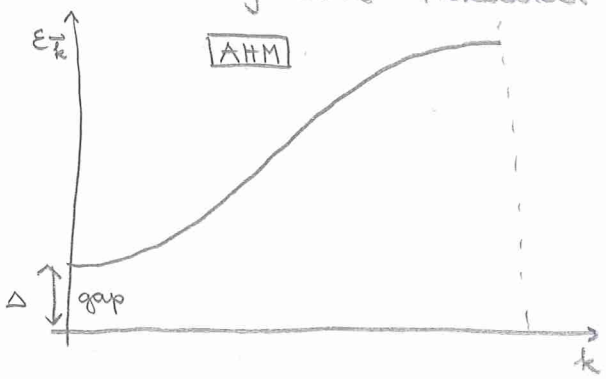
izvzem ker so vsi enaki

ker v vsaki mreži obstaja $\vec{R}_j$ in $-\vec{R}_j$ od tega ostane le $\cos(\vec{k}\vec{R}_j)$

$$\varepsilon_{\vec{k}} = J \sum_{j \text{ n.s. } 0} \sin^2 \frac{\vec{k}\vec{R}_j}{2}$$

Za AHM (anizotropen Heisenbergov model) dobimo nekoliko drugačen rezultat





Vzrok, da v IHM ne dobimo reže je ravno izotropnost.

V fiziki delcev - Goldstoneov teorem

(ni gapa → ni mase ; zlomitev zvezne simetrije → ni mase)

→ **Višja vzbujena stanja:**

(ni več točno rešljivo)

Lahko predpostavimo, da so obrnjeni spini neodvisni.

$E = E_0 + \sum_k n_k \varepsilon_k$ $\quad n_k = 0, 1, 2, 3 \ldots$ ~ bozoni

To seveda ni čisto res, dodamo še popravek zaradi interakcije med njimi

$$E = E_0 + \sum_k n_{\vec{k}} \varepsilon_{\vec{k}} + E'_{int}$$

$\boxed{\text{magnon}}$ = vzbujeno stanje z valovnim vektorjem $\vec{k}$, energijo $\varepsilon_{\vec{k}}$, $S = 1$ → ker smo obrnili spin

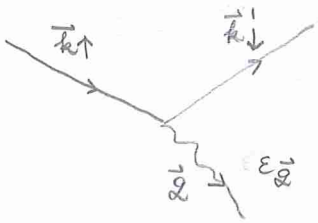
$n_{\vec{k}}$ je število magnonov.

Če E'_{int} zanemarimo, zanje velja Bose-Einsteinova statistika. → BOZONI

$$\langle n_{\vec{k}} \rangle = \frac{1}{e^{\beta \varepsilon_{\vec{k}}} - 1} = \frac{tr(n_{\vec{k}} e^{-\beta H})}{tr(e^{-\beta H})}$$

• **Uklonjenje magnonov**

- neelastično sipanje nevtronov



← kontrolirati je treba polarizacijo nevtronov

$(+\vec{K})$ ← nekaj lahko vzame mreža, $\vec{K}$ vektor recipročne mreže

$\vec{k}' + \vec{Q} = \vec{k} \perp$ (ohranitev gibalne količine)

$\varepsilon_{\vec{Q}} = E_{\vec{k}} - E_{\vec{k}'}$

običajno $J < 0{,}1\,eV$

↳ tipične en. termičnih nevtronov

Posledice:

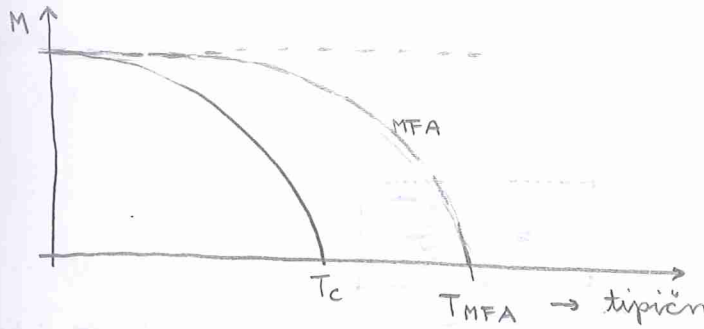
$$M(T > 0) \overset{T \gg 0}{\propto} \langle S^z_{tot} \rangle = \langle S^z_{max} \rangle - \sum_{\vec{k}} \langle n_{\vec{k}} \rangle$$

$$\sum_{\vec{k}} n_{\vec{k}} \propto \int_0^\infty \frac{k^{d-1}\, dk}{e^{\beta \xi k^2} - 1} \qquad \beta = \frac{1}{k_B T}$$

← d dimenzij

$$M(T \to 0) = M_0 - \eta T^{3/2}$$

(bistveno drugače od MFA!)



→ tipično je $T_c < T_{MFA}$

Kaj pa v 1 ali 2 dim.?

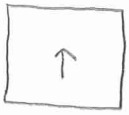
v 2D: logaritemska diverginca
1D: še huje

} v IHM NI PREHODA v manj kot 3D ! (pri $T > 0$)

Feromagnetne domene in histereza

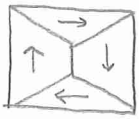
28.11.

$T < T_c$: spontana magnetizacija $M_s = M(B_0 = 0) \neq 0$



homogen M_s:
enodomenska struktura

Tipičen primer:



večdomenska struktura

• Nastanek domen

a) MAGNETNA ANIZOTROPIJA (določene smeri so preferenčne za magnetizacijo v kristalu)

→ spin sklopljen v tirno vrtilno kol.

→ zaradi kristalnega polja so smeri $\vec{L}$ določene in s tem tudi spin

• enoosni FM:

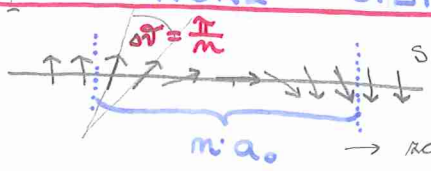
$$\frac{\overset{\text{en.}}{U}}{\underset{\text{volumen}}{V}} = u = \alpha M^2 \sin^2 \vartheta$$

α... parameter anizotropije

ker je efekt $\cdot M$ enak kot pri M

b) energija potrebna za nastanek DOMENSKE STENE (BLOCHOVE STENE)

v 1D:



S... velikost spina

→ za to rabimo energijo! Koliko pa?

$$\Delta E_{ex} = -J \sum_i (\vec{S}_i \cdot \vec{S}_{i+1} - S^2) = -J \sum_i^n S^2 (\cos\vartheta - 1) = J S^2 n \left(\frac{\Delta\vartheta}{2}\right)^2$$

$$\Delta E_{ex} = J s^2 \frac{\pi^2}{2n}$$

→ za ta člen je ceneje, če je stena čim večja

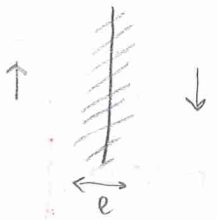
Po drugi strani: $\Delta U = \tilde{\alpha}\, l$ → široka stena je za ta člen draga

$$\Delta E_{ex} + \Delta U = \frac{\tilde{\beta}}{l} + \tilde{\alpha}\, l = min.$$

$$-\frac{\tilde{\beta}}{l^2} + \tilde{\alpha} = 0 \longrightarrow \boxed{l = \sqrt{\frac{\tilde{\beta}}{\tilde{\alpha}}}}$$

debelina Domenske Stene (DS)

Fe: $l \sim 300\, a_0$ (a_0 ... mrežna razdalja ~Å)



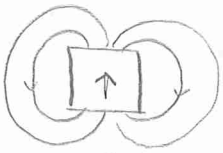
→ običajno se definira en. na enoto površine:

$$\boxed{\Delta E_d = \varepsilon_d \cdot S}$$

ε_d ... površinska energija domenske stene

Domenske stene vedno plačamo, nekaj potem sploh pride do njih??

c) ENERGIJA MAGNETNEGA POLJA (posledica DIPOLNEGA POLJA)



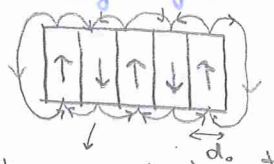
$$\Delta E_M = \int \frac{B^2}{2\mu_0}\, dV$$

do sedaj smo to zanemarili

ta situacija ni zelo ugodna (zelo veliko polja naokrog); dipoli bi želeli biti $\overset{+}{\downarrow}\overset{-}{\uparrow}\overset{+}{\downarrow}\overset{-}{\uparrow}$ $\;{}_{-}\;{}_{+}\;{}_{-}\;{}_{+}$ tako

enoosni FM: bolj ugodno bi bilo tole (za dipole!)

ni ravno običajen



$$\Delta E_M < \Delta E_M^{\uparrow}$$

za 1 samo domeno

stene nekaj stanejo!

Včitno obstaja nek minimum:

$$\Delta E_{tot} = \Delta E_M + \Delta E_d = min$$

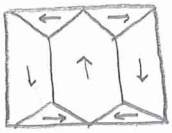
⇒ dobimo d_0 (velikost domene)

$$\boxed{d_0 \sim \mu m}$$

Fe ima kubično os. c. → KUBIČNA ANIZOTROPIJA

(še bolj pestre domene)

$\boxed{\overline{M} = 0}$

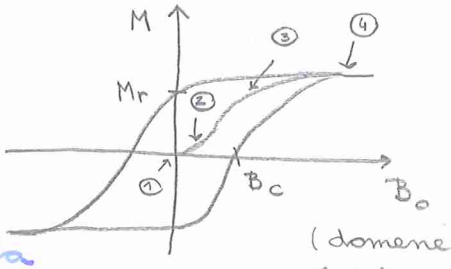


(še bolj ugodno; skoraj niž B zunaj)

→ navzven NE KAŽE magnetizacije

• **Histereza:** → lastnost urejenih struktur na splošno

FM: $T < T_c$ (nad T_c ni histereze)

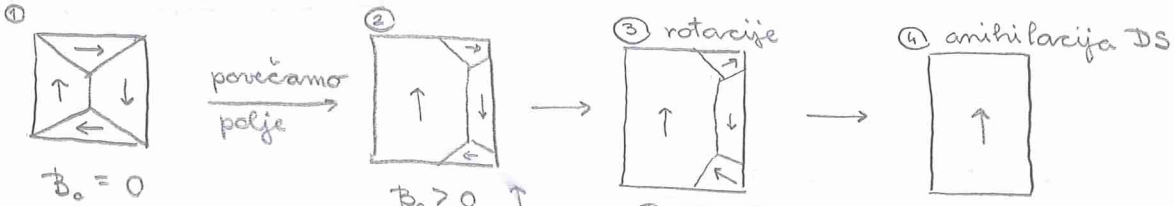


M_r... remanentna magnetizacija

B_c... koercitivno polje

(domene so zelo lahko gibljive, če je kristal čist)

Primer:



① $B_0 = 0$

② $B_0 > 0$ ↑ še reverzibilno (če izključiš gre nazaj)

③ $B_0 \gg 0$ ↑ (ni več reverzibilno)

④ $B_0 \gg$ ↑ saturacija

Uporaba:

→ B_c velik*: "trdi" nehomogeni (zmati) materiali — onemogoča gibanje — DS se ujamejo na nečistocah

↳ če so zrna ~μm je vsako zrno domena

nazaj se gre po drugačni poti

pojaviti se morajo domenske stene (iz robov ali pa jedro v sredi)

- keramika (DS se ne morejo premikati, domena se lahko le v celoti obrne)

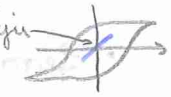
⇒ PERMANENTNI MAGNETI: Alnico V → $B_c = 0{,}06\,T$ ($AlNiCo_5$) (v zvočnikih)

$SmCo_5$ → $B_c = 1\,T$

→ B_c majhen: "mehki mag. materiali"

⇒ TRANSFORMATOR (histereza = izgube / segrevanje)

v tem področju



želimo pa čim večji naklon okrog 0 (če ni snovi je naklon 0; vakuum ni ravno dober transformator ☺)

• supermalloy: $B_c = 2 \cdot 10^{-7}\,T$

* (lava na dnu oceana si "zapomne" mag. polje Zemlje; ko se ohladi pride pod T_c; domenske stene se obrnejo v času reda velikosti starosti vesolja) (v zmatih materialih)