

Dielektrične lastnosti izulatorjev

- električni izulator: $\rho_{pr} = 0$ (gostota prostega maboja)

- električna polarizacija: $\vec{P} = \frac{1}{V} \sum \vec{p}_i$


(vezani maboji!)

definiramo še gostota električnega polja:

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

$$\nabla \vec{D} = \rho_{pr}$$

$$\nabla \vec{D} = \epsilon_0 (\nabla \vec{E}) + \nabla \vec{P} = \rho_{pr}$$

- ρ_v ... gostota vezanih mabojev

$$\epsilon_0 \nabla \vec{E} = \rho_{pr} + \rho_v = \rho$$

magnetizacija podobno uporablja,
 & ta razlika da prostih magnetnih monopolov ni

Urnovi ločimo glede na odziv na električno polje:

- paraelektrik

$$\vec{P} = \epsilon_0 \chi \vec{E}$$

χ ... dielektrična suscepabilnost

$$\vec{D} = \epsilon_0 (1 + \chi) \vec{E} = \epsilon_0 \epsilon \vec{E}$$

(v splošnem tensor!)

ϵ ... dielektrična konstanta

(ta razlika od magnetizma je χ vedno pozitiven!)

- feroelektrik \rightarrow spontana polarizacija (električna)

$$\vec{P}(\vec{E} = 0) = \vec{P}_s \neq 0$$

(pojav ni tako komplikiran, a je bil odkrit na feromagnetičnosti)

$$P_s(T < T_c) \neq 0 \quad (\text{pojavi se pod } T \text{ prehoda})$$

\rightarrow za razlago ne potrebujemo QM

\rightarrow pojavi so bistveno močnejši / večji efekt, večje energije...

$$(\chi_n \approx 10^{-5} \quad \chi_e \approx 1 \text{ ?})$$

• POLARIZABILNOST ATOMA :

atom: $\vec{P} \uparrow \oplus \uparrow \vec{E}$ $\vec{P} = \alpha \vec{E}$ $\alpha \dots$ polarizabilnost

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_{i \in V} \vec{P}_i = \frac{1}{V} \sum_{i \in V} \alpha_i \vec{E}_i$$

na razliku magnetizma to mi le
kunanje polje!

$\vec{E}_i \dots$ lokalno polje
($\neq \vec{E}_0 \dots$ zun. polje)

→ Lokalna polja



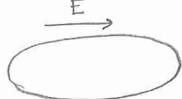
a) DEPOLARIZACIJSKO POLJE

→ zun. polje $\vec{E}_0 \rightarrow$ pojavlji se $\vec{P} \rightarrow$ nevezani malozi → polje n.v. merni

$$f_V = -\nabla \vec{P} \rightarrow \vec{E}_1$$

(ob predpostavki \vec{P} = homogen tanko izračunamo za + telo)

• elipsoid:



homogen \vec{P}, \vec{E}_1 izračunamo

(če \vec{E}_0 n.v. merni lastnih osi ne ZAKOMPPLICIRA)

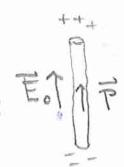
$$E_{1\alpha} = -N_\alpha \frac{\vec{P}}{E_0} \quad (\alpha = x, y, z)$$

depolarizacijski faktori: $N_x + N_y + N_z = 1$

Limite:

$$N \approx 0 \quad (\text{malozi so daleč manazem})$$

• palica:



$$\vec{E}_1 = 0$$

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P}$$

• razsežna

• plošča:



$$f_V = \nabla \vec{P} = \frac{1}{S}$$

$$\rightarrow \vec{E}_1 = -\frac{\vec{P}}{\epsilon_0 S}; \quad N = 1$$

$$\vec{D} = \epsilon_0 \vec{E} + \vec{P} = \epsilon_0 \vec{E} \quad \leftarrow \text{ostane samo kunanje polje} \\ (\vec{P} "uniči" samo sebe)$$

• krogla:



→ pojavlji se površinski maloj $G = 5/8$

$$G = P \cos \vartheta$$

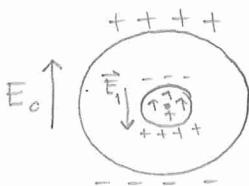
$$\rightarrow N = \frac{1}{3} \quad (\text{vse 3 merni so enake})$$

$$E_1 = - \int \frac{G dS \cos \vartheta}{4\pi \epsilon_0 r^2} = - \int \frac{P \cos^2 \vartheta \cdot 2\pi r^2 d(\cos \vartheta)}{24\pi \epsilon_0 r^2} = - \frac{P}{3\epsilon_0}$$

$$\vec{E} = \vec{E}_0 - \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}; \quad \vec{D} = \epsilon_0 \vec{E}_0 + \frac{2}{3} \vec{P}$$

g) LOKALNO POLJE NA MESTU ATOMA

- najblizje obrazovanamo direktno, ostale kot sredstvo



$$\vec{E}(r) = \vec{E}_0 + \vec{E}_1 + \vec{E}_2 + \vec{E}_3 + \vec{E}_4$$

↑ ↑ ↑ ↑
Lorentz rototraj. rotoline.

račno - interakcija,
za atom ne pride
v početek

Za kubično simetrijo: $\vec{E}_3 = 0$?

$$\vec{E} = -\frac{1}{4\pi\epsilon_0 r^3} \left(\vec{j} - \frac{3(\vec{j} \cdot \vec{r})\vec{r}}{r^2} \right) \quad \leftarrow \text{tipično dipolno polje}$$

$$\vec{j} = j\hat{e}_z \rightarrow E_z = -\frac{j(r^2 - 3z^2)}{4\pi\epsilon_0 r^5}$$

$$E_{3z} = \sum_i \frac{j}{4\pi\epsilon_0} \left(\frac{\pi_i^2 - 3z_i^2}{\pi_i^5} \right) = \frac{j}{4\pi\epsilon_0} \sum_i \frac{x_i^2 + y_i^2 - 2z_i^2}{\pi_i^5} \rightarrow \text{čitno 0 za kubično sim.}$$

$$E_2 = \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \quad (\text{glej (a)})$$

$E_0 + E_1 = E \rightarrow$ makroskopsko polje

$$\boxed{\vec{E}_e = \vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0}}$$

$\left\{ \begin{array}{l} \text{izpeljano za SC, tista} \\ \text{z je prav tako posledica} \\ \text{kubične strukture} \end{array} \right.$

$$\vec{P} = \frac{1}{V} \sum_{i \in V} \alpha_i \vec{E}_{ei} = \sum_j c_j \alpha_j \vec{E}_{ej} = c_\alpha \vec{E}_e$$

$$\vec{P} = c_\alpha \left(\vec{E} + \frac{\vec{P}}{3\epsilon_0} \right) \Rightarrow \boxed{\vec{P} = \frac{c_\alpha}{1 - \frac{c_\alpha}{3\epsilon_0}} \vec{E}}$$

$$c_\alpha = \sum_j c_j \alpha_j$$

\hookrightarrow neke vrste polarizabilnost

$$\vec{P} = \frac{3\gamma}{1-\gamma} \epsilon_0 \vec{E}$$

$$\vec{P} = \epsilon_0 (\epsilon - 1) \vec{E} \rightarrow \epsilon - 1 = \frac{3\gamma}{1-\gamma} \rightarrow \epsilon = 1 + \frac{3\gamma}{1-\gamma}$$

$$\boxed{\epsilon = \frac{1+2\gamma}{1-\gamma}}$$

nverza NI LINEARNA!

$$\hookrightarrow \boxed{\gamma = \frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \frac{c_\alpha}{3\epsilon_0}}$$

(Pri magnetizmu so vrednosti μ majhne, zato tega nismo počeli)

Claussius - Clasottijeva nverza

$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega t}; \vec{D} = \vec{D}_0 e^{i\omega t} \rightarrow \vec{D}_0 = \epsilon(\omega) \epsilon_0 \vec{E}_0$$

$$\epsilon(\omega) = \epsilon'(\omega) - i\epsilon''(\omega)$$

$$W \propto \langle j \cdot E \rangle = \left\langle \frac{d\vec{P}}{dt} \cdot \vec{E} \right\rangle \propto \underline{\underline{\epsilon''(\omega) E_0^2 \omega \epsilon_0}}$$

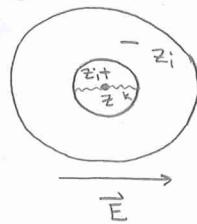
\uparrow
izgube

→ Polarizabilnost

a) ATOMSKA POLARIZABILNOST

V principu bi morali to poračunati kvantnomehaniško; z upoštevanjem način orbital.

Raje se bomo tega lotili kvaristatično + komentar.



$$\vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega t}$$

$$z_i m \ddot{x} = -z_i e_0 E - kx$$

$$-z_i m \omega^2 x_0 = -z_i e_0 E_0 - kx_0$$

polarizabilnost
 $E = z_i \alpha e x_0$

(v splošnem lahko ion)

$$x_0 = \frac{-z_i e_0}{k - z_i m \omega^2} E_0 ; \quad \alpha = \frac{z_i e_0 x_0}{E_0} \text{ - def.}$$

$$\rightarrow \alpha = \frac{z_i e_0^2}{m(\omega_0^2 - \omega^2)}$$

Harmonika

$\omega_0 = \frac{k}{z_i m e} \sim$ frekvence medelektronskih prehodov

$$\text{Kvantno to pripisujo} \rightarrow \alpha^{\text{at}}(a) = \frac{e_0^2}{m} \sum_{ij} \frac{f_{ij}^2}{w_{ij}^2 - \omega^2}$$

Torej prehodi med različnimi elektronskimi stanji!

$\omega \sim$ vidna svetloba, pri dosti neč \sim konstantno!

$$E_\phi = E(\omega = 0)$$

Kovalentni kristali: C Si Ge kovina
 $E_\phi \approx 5,7 \rightarrow 12 \rightarrow 16 \dots \infty$

→ polprevodniki, vsek se manjša, če bi prišli do kovine

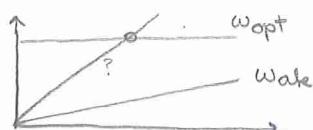
$$E_\phi \rightarrow \infty \Rightarrow$$
 senčenje!

Zatočnja Albolova: GaN, modra dioda

b) IONSKI KRISTALI

→ sklopljeno nihanje

- optična mreža
+ EM valovanje



$$\vec{w} = \frac{e}{M} \vec{E} - \frac{2k}{M} \vec{w}_0$$

$$\vec{q} = e \vec{w} = e (\vec{U}_+ - \vec{U}_-)$$

$$M_+ \vec{U}_+ = e \vec{E} - 2k(\vec{U}_+ - \vec{U}_-) \quad \left. \right\} \quad \vec{w} = \frac{e}{M} \vec{E} - \frac{2k}{M} \vec{w}_0$$

$$M_- \vec{U}_- = -e \vec{E} - 2k(\vec{U}_- - \vec{U}_+) \quad \left. \right\} \quad \left. \right. - \omega^2 \vec{w}_0 = \frac{e}{M} \vec{E}_0 - \frac{2k}{M} \vec{w}_0$$

$$\frac{1}{M_+} + \frac{1}{M_-} = \frac{1}{M}, \quad \vec{E} = \vec{E}_0 e^{i\omega t}$$

$$\vec{w}_0 = \vec{w}_0 e^{i\omega t}$$

$$\vec{w}_0 = \frac{e \vec{E}_0}{M(\omega_0^2 - \omega^2)} \rightarrow \alpha^{\text{opt}} = \frac{e^2}{M(\omega_0^2 - \omega^2)}$$

$$\gamma = \frac{\epsilon(\omega) - 1}{\epsilon(\omega) + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0 V_0} (\alpha_+ + \alpha_- + \frac{e^2}{M(\omega_{opt}^2 - \omega^2)})$$

$$\epsilon_\infty = \epsilon(\omega \rightarrow \infty) \quad \frac{\epsilon_\infty - 1}{\epsilon_\infty + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0 V_0} (\alpha_+ + \alpha_-)$$

$$\epsilon_\phi = \epsilon(\omega \rightarrow 0) \quad \frac{\epsilon_\phi - 1}{\epsilon_\phi + 2} = \frac{1}{3\epsilon_0 V_0} (\alpha_+ + \alpha_- + \frac{e^2}{M\omega_{opt}^2})$$

Jasno: $\epsilon_\infty < \epsilon_\phi$!

	LiF	NaCl	LiI
ϵ_∞	1,96	2,34	3,8
ϵ_ϕ	9,0	5,9	16,8

dosti več;
vrak so mrežna
mihanje

$$\epsilon(\omega) = \epsilon_\infty + \frac{\epsilon_\phi - \epsilon_\infty}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_T^2}}$$

$$\Delta\gamma = \gamma_\phi - \gamma_\infty$$

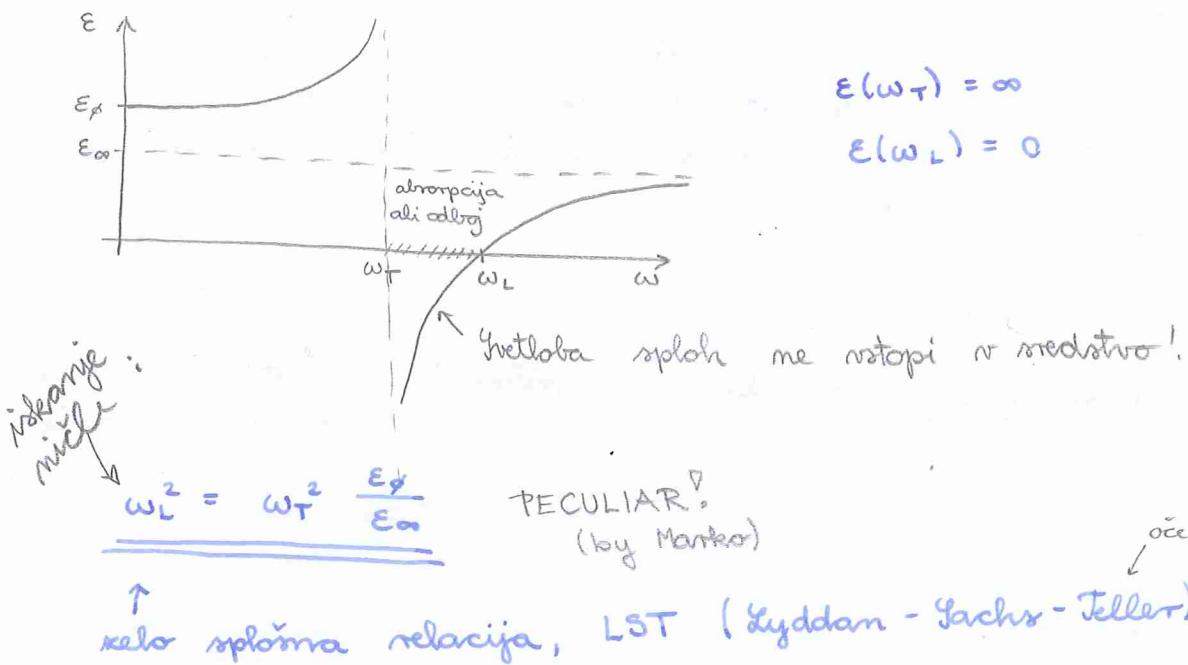
transverzalno
mihanje

$$\frac{\epsilon - 1}{\epsilon + 2} = \gamma_\infty + \frac{\Delta\gamma}{1 - \frac{\omega^2}{\omega_{opt}^2}} = \gamma$$

→ grd račun (racionalizacija):

$$(1 - \gamma_\infty)(\omega_{opt}^2 - \omega_T^2) - \Delta\gamma \omega_{opt}^2 = 0$$

$$\omega_T^2 = \omega_{opt}^2 - \frac{1 - \gamma_\infty}{1 - \gamma_\infty} = \omega_{opt}^2 - \frac{\epsilon_\infty + 2}{\epsilon_\phi + 2}$$



PECULIAR!
(by Marko)

oce at. bombe

velko sploma relacija, LST (Lyddan - Sachs - Teller)

$$\left(c = \frac{c_0}{\epsilon_\phi \mu_\phi} \quad \leftarrow \text{takso sta oba negativna} \right)$$

$$D(\omega) = \epsilon(\omega) \epsilon_0 E(\omega)$$

matrički:

$$\begin{Bmatrix} \vec{D} \\ \vec{E} \\ \vec{P} \end{Bmatrix} = \begin{Bmatrix} \vec{D}_0 \\ \vec{E}_0 \\ \vec{P}_0 \end{Bmatrix} e^{i\omega t}$$

$$\nabla \cdot \vec{D} = g_{\text{prost}} = 0 \rightarrow \vec{k} \cdot \vec{D} = 0$$

$$\hookrightarrow \vec{D} \perp \vec{k} \text{ ali } \vec{D} = 0$$

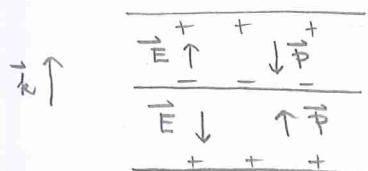
$$\epsilon(\omega_L) = \infty$$

$$\epsilon(\omega_T) = 0$$

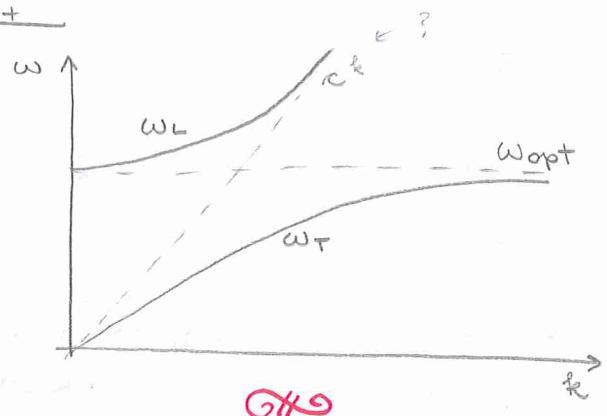
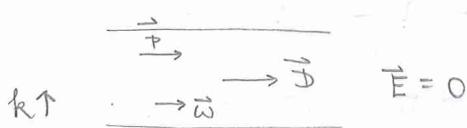
$$\text{ali } \vec{E} \parallel \vec{k}$$

$$\nabla \cdot \vec{E} = - \frac{\partial \vec{B}}{\partial t} = 0 \rightarrow \vec{k} \times \vec{E} = 0 \Rightarrow \vec{E} = 0$$

$\omega_L \dots$ longitudinalno mihanje



$\omega_T \dots$ transverzalno mihanje



Piroelektrični

paraelektrični: $P_s(\vec{E}=0)=0$ narašča od feromagnetizma

piroelektrični: $P_s(\vec{E}=0) \neq 0 \rightarrow$ je zavor lahko trivijalen

$\vec{p}_0 = \sum_{i \in V_c} e \vec{r}_i$ \leftarrow dipolni moment celice!
odvisno od izbrane celice!

$$\vec{P} = n \vec{p}_0$$

$$\nabla \vec{P} = g_V$$

+	-	+	-	+	-
-	+	-	+	-	+
+	-	+	-	+	-

$$\vec{p}_0 \neq 0!$$

\rightarrow Smiselnno moramo izbrati celico, ki ustreza navedenim robnim pogojem

če ustreza navedenim robnim pogojem!

+	-	+	-
-	+	-	+
+	-	+	-
-	+	-	+

etc.

če je $\vec{p}_0 = 0$ (ker obstaja center inverzije)

V kakšnem primeru bi ga lahko imeli?

Centra inverzije nimajo npr. $\text{LiNbO}_3 \dots$

Pod vplivom T pride do spremembe polarizacije!

Ukrat s (zum.) el. poljem Ni možen,

točaj to ni posebno uporabno.

$$T_c = \infty ?$$

možno posred

Ferroelektrični

Ferroelektrični pa se obnijo pod vplivom polja, avendar je spontana polarizacija pojavi ūle pod neko temp. T_c .

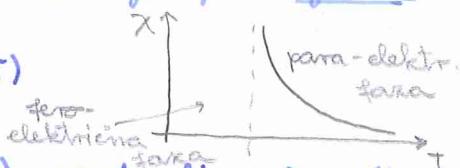
$$\epsilon - 1 = \chi = \frac{3\gamma}{1-\gamma} \rightarrow \text{prehod je pri } \underline{\gamma = 1}.$$

Torej, če $\gamma = \gamma(T) \Rightarrow \chi(T)$

↑

$$\gamma(T) = \gamma(T_c) + \tilde{\alpha}(T_c - T) \rightarrow \text{to bi dalo Curie-jev zakon}$$

$$\chi = \frac{3\tilde{\alpha}}{\tilde{\alpha}(T-T_c)} \quad \text{kjer je } \tilde{\gamma}(T_c) = 1$$



Ta pojav so prvič opazili v Rochelle-ski soli: $KNaC_4H_4O_6 \cdot 4H_2O$

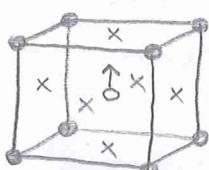
$$T_c = 20^\circ C \quad (\text{para} \rightarrow \text{fero})$$

Fazni prehod PE \rightarrow FE \Rightarrow STRUKTURNI FAZNI PREHOD
 center inverzije c-i center inverzije + c-i!

To eni strani bolj preprosto od paramagnetizma ker na razlagu ne rabimo kvantne mehanike, mori pa so bolj kompleksne.

a) Tipično so to perovskiti oblike ABO_3 .

	$BaTiO_3$	$PbTiO_3$	$KNiO_3$
$T_c(K)$	393	763	706



• o ... A, B
 x ... O (kriki)

\rightarrow tipično se mednji premakne na $\vec{u} \neq 0$
 pri $T < T_c$

b) red-nered v FE: rodikova vez



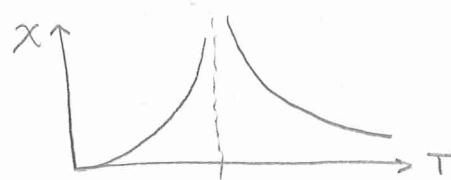
	KH_2PO_4	KD_2PO_4	RbH_2PO_4
$T_c(K)$	123	213	147

Fazni prehod PE \rightarrow FE

Poznamo 1. vrsto (merverni) in 2. vrsto (rversni)

$$E_\phi - 1 = X(T < T_c) = \frac{c}{T - T_c}$$

Curie



$$P(T < T_c) \propto (T_c - T)^\beta \rightarrow \beta = 1/2 \quad (\text{MFA?})$$

dostični / standardni kritični eksponent

* Teorija povprečnega polja tu bolje velja, saj gre za dipolne sile \rightarrow sile dolgega dosegca!

$$\text{Relacija LST: } \frac{E_\phi}{E_\infty} = \frac{\omega_L^2}{\omega_T^2} \quad \omega_T^2 = \omega_L^2 \frac{E_\infty}{E_\phi} \xrightarrow{T \geq T_c} \omega_T^2 \rightarrow 0$$

Je fazni prehod; Soft model / mehko nihanje
premik atoma v celici! optična veja?

Fenomenološka teorija faznih prehodov

\rightarrow termodinamski potencial: (Landau)

$$F(T, p, E_0, P) \quad \text{prosta energija } E_0, T, p \quad \text{... ureditveni parameter}$$

$$dF = -SdT + Vdp - PdE$$

$$\rightarrow \text{ka } E_0 = 0 : F(T, P) = \min \rightarrow P(T)$$

- $F(T, P)$ nadreča simetriji kristala: $F(-P) = F(P)$
- $F(T, P)$ analitična funkcija tudi pri $T = T_c$

$$F(P) = F_0 + \frac{\alpha}{2}P^2 + \frac{\beta}{4}P^4 + \frac{\gamma}{6}P^6 + \dots$$

$$F_0, \alpha, \beta, \gamma, \dots \rightarrow f(T)$$

$$\rightarrow \text{ka } E_0 \neq 0 \quad \Delta F = -V \cdot P \cdot E$$

$$\text{Ukupaj: } F = F_0 + \frac{\alpha}{2}P^2 + \frac{\beta}{4}P^4 + \frac{\gamma}{6}P^6 - VPE. \quad \begin{matrix} \alpha, \beta, \gamma \text{ ne odvisni od } V \\ (P = \text{parametar?}) \end{matrix}$$

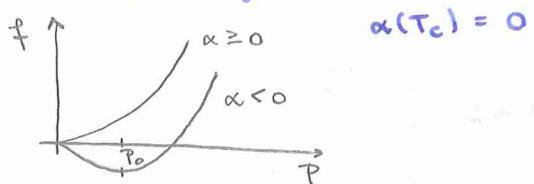
ponavadi gledamo gostoto proste energije

$$f = \frac{F}{V} = f_0 + \frac{\alpha'}{2}P^2 + \frac{\beta'}{4}P^4 + \frac{\gamma'}{6}P^6 - PE.$$

Poglejmo najprej $E_0 = 0$. Isčemo minimum:

$$\frac{\partial f}{\partial P} = 0 = \alpha P + \beta P^3 + \gamma P^5$$

če je $\beta > 0$ je to FP 2. reda



Ko α zamenja predznak na Θ ne pojavi minimum pri $P \neq 0 \Rightarrow$ točaj SPONTANA POLARIZACIJA

$$\alpha P + \beta P^3 = 0 \quad \alpha < 0 \quad \alpha + \beta P^2 = 0$$

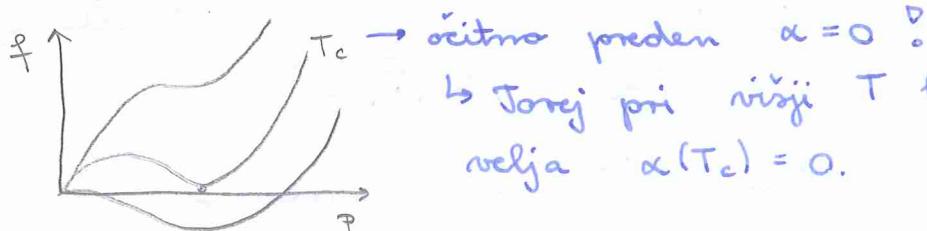
$$\rightarrow P_0 = \sqrt{\frac{\alpha}{\beta}} \sqrt{T_c - T} \quad T < T_c$$

$$\underline{E_0 \neq 0} \quad P \text{ pri } T > T_c: \alpha P - E_0 = 0 \rightarrow P = \frac{E_0}{\alpha}$$

$$X = \frac{P}{E_0} \propto \frac{1}{T - T_c} \rightarrow \text{spet Curie} \checkmark$$

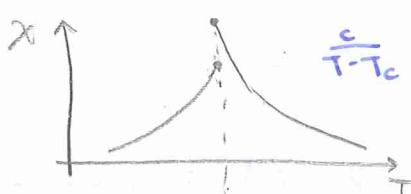
Problemi so lahko ko $f(T_c)$ ni analitična!

Traj pa $\beta < 0, \gamma > 0$: FP 1. reda



→ ocitno poreden $\alpha = 0$:

↳ Točaj pri višji T kot tisti, kjer velja $\alpha(T_c) = 0$.



\leftarrow zlomi se poreden pride do divergencije;
lahko bi izračunali latentno topototo.

Fakulteta za matematiko in fiziko
Univerza v Ljubljani

Peter Prelovšek

TEORIJA TRDNE SNOVI

Podiplomski študij fizike

Ljubljana 1999

12

Spinski modeli

Če opustimo konstantni člen v H_{ef} , dobimo Heisenbergov spinski hamiltonian

$$H = -J \sum_{\langle ij \rangle} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j . \quad (12.1)$$

Pomembna lastnost spinske sklopitve v tem modelu je invariantnost na rotacije v spin-skem prostoru (izotropna sklopitev), ki je posledica izvora sklopitve, to je Paulijevega izključitvenega načela. V tem oziru je magnetna izmenjalna sklopitev bistveno različna od klasične dipolne, ki je odvisna tudi od smernega vektorja med mesti.

Za en sam par mest (npr. za molekulo H_2) je moč najti lastna stanja H ,

$$\begin{aligned} \text{singlet } S = 0 : \quad & |\varphi\rangle = \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle - |\downarrow\uparrow\rangle] , \quad E = \frac{3}{4}J , \\ \text{triplet } S = 1 : \quad & \left. \begin{aligned} |\varphi\rangle &= |\uparrow\uparrow\rangle , & S_z &= 1 , \\ |\varphi\rangle &= \frac{1}{\sqrt{2}}[|\uparrow\downarrow\rangle + |\downarrow\uparrow\rangle] , & S_z &= 0 , \\ |\varphi\rangle &= |\downarrow\downarrow\rangle , & S_z &= -1 , \end{aligned} \right\} \quad E = -\frac{1}{4}J . \end{aligned} \quad (12.2)$$

V primeru $J < 0$ je osnovno stanje za izoliran par singlet, torej antiparalelna ali **antiferomagnetna** (AFM) ureditev sosednjih spinov. To je dejansko primer za večino snovi z lokaliziranimi magnetnimi momenti, oz. za **magnetne izolatorje**. Kljub pol zapoljenemu pasu tu ni prostih prevodnih elektronov, čeprav ne pride nujno do AFM reda.

V realnih snoveh so magnetne sklopitve bolj komplikirane, kot jih popisuje Heisenbergov model. Upoštevati je treba, da je v splošnem več elektronov na mesto (torej možen zapis z večjimi spini $S > \frac{1}{2}$), da obstaja tirno-spinska $\vec{L} \cdot \vec{S}$ sklopitev, da imajo nekubične mreže nižjo simetrijo itd. V mnogih primerih je še nadalje smiseln zapis efektivnega hamiltoniana v bazi $S = \frac{1}{2}$ spinov, vendar pa postane sklopitev anizotropna (v spinskem prostoru) in vključuje tudi bolj oddaljene sosedje. Tak model imenujemo **anizotropni Heisenbergov model**,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ \alpha,\beta}} J_{ij}^{\alpha\beta} S_{i\alpha} S_{j\beta} , \quad (12.3)$$

rencno smerjo, npr. z ,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} S_{iz} S_{jz} . \quad (12.4)$$

katerih snoveh je sklopitev med najbližjimi sosedi $J > 0$. Te snovi težijo k paralelni oz. nagnetni ureditvi spinov.

1 Približek povprečnega polja

termodinamske lastnosti spinskih modelov, tako klasičnih (kjer nadomestimo spinske torje \vec{S}_i s klasičnimi vektorji, $|S_i| = 1/2$) kot še bolj kvantnih, so znane v zelo redkih rih. Eksaktno rešljivih je več enodimenzionalnih modelov ($d = 1$ Isingov model za $T > 0$, $d = 1$ Heisenbergov model pri $T = 0$), Isingov model v $d = 2$ (Onsagerjeva rešitev) ter drugi modifirani modeli, ki so manj fizikalni. V taki situaciji imajo izreden a enostavni približki, zlasti približek povprečnega (molekularnega) polja (mean field approximation – MFA).

MFA prevedemo reševanje večspinskega sistema na problem posameznih spinov, ki efektivno stalno polje. To dosežemo z linearizacijo

$$\vec{S}_i \cdot \vec{S}_j \longrightarrow \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \vec{S}_j + \langle \vec{S}_j \rangle \cdot \vec{S}_i - \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle , \quad (12.5)$$

vede Heisenbergov model v prisotnosti zunanjega polja \vec{B} ,

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \vec{S}_i \cdot \vec{S}_j - \gamma \sum_i \vec{S}_i \cdot \vec{B}_0 , \quad \gamma = -\bar{\gamma} = -g\mu_B , \quad (12.6)$$

tivni hamiltonian H_{MFA} ,

$$\begin{aligned} H_{MFA} &= -\gamma \sum_i \vec{B}_{ef}^i \cdot \vec{S}_i + \frac{1}{2} \sum_{i,j} J_{ij} \langle \vec{S}_i \rangle \cdot \langle \vec{S}_j \rangle , \\ \vec{B}_{ef}^i &= \vec{B}_0 + \frac{1}{\gamma} \sum_j J_{ij} \langle \vec{S}_j \rangle . \end{aligned} \quad (12.7)$$

čutijo torej poleg zunanjega polja tudi termodinamsko povprečeno polje zaradi interakcij s sosednjimi spini.

kalna povprečja $\langle \vec{S}_i \rangle$ lahko z upoštevanjem neodvisnosti spinov v H_{MFA} izračunamo izhubo temperaturo $T > 0$. Za $S = 1/2$ dobimo

$$\langle \vec{S}_i \rangle = -\frac{\vec{B}_{ef}^i}{2B_{ef}^i} \text{th} \frac{\beta}{2} \bar{\gamma} B_{ef}^i , \quad \beta = \frac{1}{k_B T} , \quad (12.8)$$

$\langle \vec{S}_i \rangle$ usmeri vedno obratno smeri lokalnega polja \vec{B}_{ef}^i . Sistem sklopljenih nelinijskih (NFA) enačb, ki odtod sledi in določa konfiguracijo $\langle \vec{S}_i \rangle$, je treba reševati samouskladno. V splošnem dajejo enačbe več rešitev, pri čemer naj bi bila fizikalna tista z najnižjo energijo.

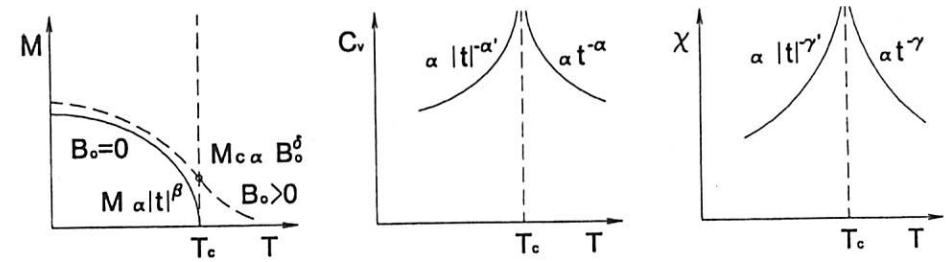
tujočimi si sklopitvami s prvimi oz. drugimi sosedji, in v modelih s slučajnimi sklopitvami, ki vodijo do faz spinskega stekla, je že samo reševanje MFA enačb zapleteno.

V običajnih primerih s feromagnetno (pa tudi AFM) sklopitvijo pa je reševanje enostavno. Pričakujemo lahko, da bodo v feromagnetu (v enostavni mreži) vsa mesta ekvivalentna, $\langle \vec{S}_i \rangle = \langle \vec{S} \rangle$ in $\langle \vec{S} \rangle \parallel \vec{B}_0 = B_0 \vec{e}_z$. MFA enačba se zapiše kot

$$\langle S_z \rangle = -\frac{1}{2} \text{th} \left[\frac{\beta}{2} \bar{\gamma} B_0 - \frac{\beta}{2} J_0 \langle S_z \rangle \right] , \quad J_0 = \sum_j J_{ij} . \quad (12.9)$$

V odsotnosti zunanjega polja $B_0 = 0$, je ena od rešitev paramagnetna $\langle S_z \rangle = 0$. Netrivialna rešitev s spontano ureditvijo spinov $\langle S_z \rangle \neq 0$ in spontano magnetizacijo obstaja za $\beta J_0 > 4$ in je tedaj tudi stabilna. MFA torej napuje fazni prehod v feromagnetno stanje pri Curiejevi temperaturi prehoda (kritični temperaturi) $T_c = J_0/4k_B$.

V bližini faznega prehoda $T \sim T_c$ je obnašanje termodinamskih količin neanalitično. Teorija napoveduje (o tem kasneje) potenčne zakone za kritične količine in definira ustreerne kritične eksponente. Najbolj značilni so potenčni zakoni za magnetizacijo M , susceptibilnost χ in specifično toploto C_V ,



kjer je $t = (T - T_c)/T_c$. MFA enačbe v bližini T_c lahko poenostavimo z razvojem,

$$\begin{aligned} \sigma &= \text{th}(b + \xi\sigma) \simeq b + \xi\sigma - \frac{1}{3}(b + \xi\sigma)^3 , \\ \sigma &= -2\langle S_z \rangle , \quad b = \frac{\beta}{2} \bar{\gamma} B_0 , \quad \xi = \frac{\beta J_0}{4} = \frac{1}{1+t} \simeq 1-t , \end{aligned} \quad (12.10)$$

a) $b = 0$: brez zunanjega polja in pri $\xi \approx 1$ dobimo

$$\begin{aligned} \sigma^3 \frac{1}{3} + t\sigma &= 0 \implies t > 0 , \quad \sigma = 0 , \\ t < 0 , \quad \sigma^2 &= -3t , \quad \text{torej } \beta = \frac{1}{2} . \end{aligned} \quad (12.11)$$

b) $t = 0$: pri kritični temperaturi je

$$0 = b - \frac{1}{3}(b + \sigma)^3 \implies \sigma^3 \simeq 3b \implies \delta = \frac{1}{3} . \quad (12.12)$$

$t \neq 0$: linearni odziv je $\chi \propto d\sigma/db$. Iz enačb sledi

$$\frac{d\sigma}{db} \simeq 1 + (1-t)\frac{d\sigma}{db} - (b + \sigma_0)^2(1 + \frac{d\sigma}{db}) \implies \frac{d\sigma}{db} \simeq \frac{1 - \sigma_0^2}{t + \sigma_0^2}, \quad (12.13)$$

$$t > 0 : \sigma_0 = 0 \implies \chi \propto \frac{1}{t}, \quad (12.14)$$

$$t < 0 : \sigma_0^2 = -3t \implies \chi \propto \frac{1}{2|t|}, \quad (12.15)$$

$= \gamma = 1$, kar je Curie-Weissov zakon.

zračun C_V potrebujemo izraz za prosto energijo,

$$\begin{aligned} F &= N \left[-kT \ln(2 \operatorname{ch} b_{ef}) + \frac{1}{8} J_0 \sigma^2 \right] = \\ &= N \left[-kT \ln(2/\sqrt{1 - \sigma^2}) + \frac{1}{8} J_0 \sigma^2 \right]. \end{aligned} \quad (12.16)$$

$$C_V = T \left(\frac{\partial S}{\partial T} \right)_{B_0} \text{ in } S = - \left(\frac{\partial F}{\partial T} \right)_{B_0}, \text{ dobimo pri } b = 0$$

$$t > 0 : S = Nk \ln 2 \implies C_V = 0,$$

$$t < 0 : \sigma^2 = -3t \implies C_V \propto \frac{\partial \sigma^2}{\partial t} \simeq \text{konst} > 0, \quad (12.17)$$

$\alpha = 0$, vendar s skokom C_V pri $T = T_c$.

Osnovno stanje spinskih modelov

e zelo koristen približek, saj omogoča smiseln popis spinskega sistema v celotnem parametru T, B_0 , tako v parafazi kot v ferofazi. Včasih pa je približek pregrub, analitativno napačen. Na to kaže že dejstvo, da so MFA enačbe dejansko neodvisne kvantizacijalnosti d sistema, ne razlikujejo (kvantitativno) kvantne spinske sisteme od teh itd. Oglejmo si zato podrobnejše najprej značaj osnovnega stanja Heisenbergovega za $S = 1/2$ pri $B_0 = 0$.

magnetna sklopitev $J > 0$:

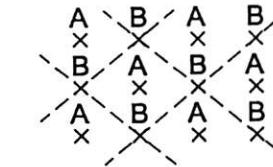
MFA dobimo pri $T = 0$ kot rešitev popolnoma urejeno konfiguracije spinov, npr. $\vec{e}_z/2$. Ustrezena valovna funkcija

$$|\psi_0\rangle = \prod_i |i \uparrow\rangle \quad (12.18)$$

na funkciji H in torej tudi točno osnovno stanje sistema. Vsak spinski par je v tem stanju, kar da minimalno možno energijo za vsak par posebej $E = -\frac{1}{4}|J|/\text{par}$.

b) antiferomagnetna sklopitev $J < 0$:

Omejimo se najprej na mreže, ki jih lahko razstavimo na dve podmreže A, B tako, da so vsi sosedji spinov \vec{S}_i^A na podmreži B itd.



MFA enačbe dajo v tem primeru rešitev z maksimalno podmrežno magnetizacijo, torej

$$\langle \vec{S}_i^A \rangle = -\langle \vec{S}_j^B \rangle = \frac{1}{2}\vec{e}_z \text{ in } E_{MFA} = -\frac{1}{4}|J|/\text{par}. \quad (12.19)$$

Pripadajoča valovna funkcija

$$|\psi_0\rangle_{MFA} = \prod_{i \in A} \prod_{j \in B} |i \uparrow\rangle |j \downarrow\rangle \quad (12.20)$$

pa ni lastna funkcija Heisenbergovega hamiltoniana, saj

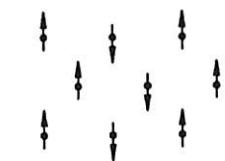
$$\sum_{(i,j)} (S_{i+}S_{j-} + S_{i-}S_{j+}) |\psi_0\rangle_{MFA} \neq \lambda |\psi_0\rangle_{MFA}. \quad (12.21)$$

Od tod sledi, da je mogoče najti stanje z $E < E_{MFA}$. Če bi bilo možno vsak par spinov dati v $S = 0$ singletno stanje, bi dosegli $E_s = -\frac{3}{4}|J|/\text{par}$. Ker to ni mogoče doseči za vsak par, je dejansko $E > E_s$. Oceno dobimo, če postavimo v $S = 0$ vsak drug par, kar da $\bar{E} = -\frac{3}{8}|J|/\text{par} < E_{MFA}$, hkrati pa ne kaže več AFM ureditev (dolgega dosega).

Pravo osnovno stanje AFM je torej komplikirano in je znano točno le za $d = 1$ verigo (Bethe 1931), kjer ni AFM reda dolgega dosega, in

$$E = -|J| \left[\ln 2 - \frac{1}{4} \right] / \text{par} = -0.44|J|/\text{par}. \quad (12.22)$$

MFA je torej slab približek za mreže z majhnim številom najbližjih sosedov z_0 (v $d = 1$ je $z_0 = 2$), postane pa boljši z naraščajočim z_0 , npr. v $d = 2$ kvadratni mreži (z $z_0 = 4$) je pričakovati AFM ureditev dolgega dosega.



Posebej slab je MFA v primerih tako imenovanih **frustriranih mrež**, npr. v trikotni mreži, kjer tudi znotraj MFA ni možno v celoti maksimirati vezavne energije. V tem primeru je npr.

$$\bar{E}_{MFA} = -\frac{1}{12}|J|/\text{par}. \quad (12.23)$$