Лекция 6

Антиферромагнетизм в приближении Вейсса.

Л.Д.Ландау, Е.М.Лифшиц, Статистическая физика, (Курс, Т.5)

Мы уже не раз выписывали гамильтониан для системы магнитных моментов, локализованных в узлах кристаллической решетки во внешнем магнитном поле

$$\hat{H} = -\mathbf{B}\sum_{\mathbf{n}}\hat{\vec{\mu}}_{\mathbf{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{n}\neq\mathbf{m}} J(\mathbf{n}-\mathbf{m})\hat{\vec{\mu}}_{\mathbf{n}}\hat{\vec{\mu}}_{\mathbf{m}},$$

где $\hat{\vec{\mu}}_{\mathbf{n}}$ - оператор магнитного момента электрона в кристаллическом узле, $J(\mathbf{n}-\mathbf{m}) = J(\mathbf{m}-\mathbf{n})$ - обменный интеграл между $\mathbf{n}$-м и $\mathbf{m}$ узлами кристаллической решетки, имеющий размерность энергии. Если $J(\mathbf{n}-\mathbf{m}) > 0$, то мы имеем дело с ферромагнетиком, если $J(\mathbf{n}-\mathbf{m}) < 0$ - то энергетически выгодно антиферромагнитное упорядочение. Иными словами, в этом случае магнитным моментам (или спинам) выгодно выстроиться так, чтобы соседние моменты были направлены в разные стороны. Возникает как бы две подрешетки, в каждой из которых спины в равновесном состоянии выстроены в одном направлении, а суммарные спины каждой из подрешеток направлены противоположно. В результате средний магнитный момент такого магнетика в равновесном состоянии равен нулю. Однако такое магнитное упорядочение имеет место. Существует также точка перехода к симметричной фазе, где такое упорядочение исчезает. Соответствующая температура называется температурой Нееля. Основное состояние такого магнетика называется неелевским. На основе выписанного гамильтониана рассмотрим переход парамагнетик – антиферромагнетик, используя сформулированное ранее приближение Вейсса.

Мысленно представим себе систему из вложенных друг в друга двух подрешеток, направление магнитных моментов в узлах подрешеток зеркально отраженное (в основном состоянии, разумеется), см. Рис 1.

Оператор магнитного момента электрона $\hat{\mu}_{\mathbf{n}}$ в отдельном узле каждой из подрешеток приближенно может быть записан в виде

$$\hat{\vec{\mu}}_{\mathbf{n}} = 2\mu_0 \hat{\mathbf{S}}_z ,$$

где $\hat{S}^z_{\mathbf{n}}$ - оператор проекции спина в n - м узле на направление внешнего магнитного поля.

Напомним, что при формулировке положений теории среднего поля для ферромагнетиков считалось, что на каждый выделенный магнитный момент в узле действует некое среднее поле, состоящее из внешнего магнитного поля и поля всех остальных узловых магнитных моментов. Оператор этого поля представляется в виде

$$\hat{\mathbf{H}} = \mathbf{B} + \sum_{\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\hat{\vec{\mu}}_{\mathbf{m}} .$$

Усредненное значение этого поля дается выражением

$$\bar{\mathbf{H}} = \mathbf{B} + \sum_{\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\bar{\vec{\mu}}_{\mathbf{m}} .$$

В силу трансляционной инвариантности системы среднее значение магнитного момента $\bar{\vec{\mu}}_{\mathbf{m}}$ в узле не может зависеть от номера узла

$$\bar{\vec{\mu}}_{\mathbf{m}} \equiv \vec{\mu} ,$$

поэтому имеем

$$\sum_{\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right)\bar{\vec{\mu}}_{\mathbf{m}} = \vec{\mu}\sum_{\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n}-\mathbf{m}\right) = \lambda N \vec{\mu} .$$

Принимая во внимание, что все магнитные моменты в узлах параллельны или антипараллельны по отношению к полю, выражение для эффективного поля можно представить в виде

$$H_{eff} = H + \lambda N \mu .$$

Намагниченность ферромагнетика определялась эффективным полем Вейсса:

$$\bar{M} = N\mu_0 th\left\{\frac{\mu_0\left(H + \lambda N\mu\right)}{T}\right\} .$$

Поскольку

$$\bar{M} = N\mu,$$

легко прийти к следующему уравнению для определения μ (уравнению Вейсса)

$$\mu = \mu_0 th\left\{\frac{\mu_0\left(H + \lambda N\mu\right)}{T}\right\}.$$

Для антиферромагнетика картина несколько меняется. Средний магнитный момент в узле «верхней» подрешетки (см. Рис.1) будем обозначать посредством $\bar{\mu}_+$, «нижней» подрешетки - $\bar{\mu}_-$. В соответствии с нашей моделью средним полем для магнитных моментов $\bar{\mu}_+$ является поле, созданное магнитными моментами $\bar{\mu}_-$ и наоборот

$$H_+ = H + \lambda N\mu_-, \quad H_- = H + \lambda N\mu_+.$$

По этой причине вместо одного уравнения Вейсса получается система двух уравнений

$$\mu_+ = \mu_0 th\left\{\frac{\mu_0\left(H + \lambda N\mu_-\right)}{T}\right\}, \quad \mu_- = \mu_0 th\left\{\frac{\mu_0\left(H + \lambda N\mu_+\right)}{T}\right\}.$$

Эту систему достаточно просто проанализировать при $H = 0$. В этом случае она обретает вид

$$\mu_+ = \mu_0 th\left\{\frac{\lambda N\mu_0\mu_-}{T}\right\}, \quad \mu_- = \mu_0 th\left\{\frac{\lambda N\mu_0\mu_+}{T}\right\}.$$

Учитывая, что для антиферромагнетиков $J\left(\mathbf{n} - \mathbf{m}\right) < 0$ (следовательно, $\lambda = \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{m}} J\left(\mathbf{n} - \mathbf{m}\right) < 0$), из уравнения можно увидеть, что существует решение

$$\mu_+ = \mu, \quad \mu_- = -\mu,$$

где μ удовлетворяет тому же уравнению для параметра порядка, что и в случае ферромагнетика

$$\mu = \mu_0 th\left\{\frac{\mu_0\left(H + \lambda N\mu\right)}{T}\right\}.$$

При этом выражение для температуры Неля Θ

$$\Theta \equiv \mu_0^2 |\lambda| N$$

совпадает с выражением для температуры Кюри. Таким образом, приходим к выводу, что температурная зависимость намагниченности для каждой из подрешеток такая же, как и в случае ферромагнетика. Суммарная же намагниченность антиферромагнетика равна нулю

$$M = N(\mu_+ + \mu_-) = 0 .$$

Рассмотрим теперь ситуацию с восприимчивостью

$$\chi = \left(\frac{\partial M}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0} = N\left\{\left(\frac{\partial \mu_+}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0} + \left(\frac{\partial \mu_-}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0}\right\}.$$

Будем рассчитывать ее при высоких температурах. Тогда

$$\mu_+ \approx \mu_0^2 \frac{H + \lambda N \mu_-}{T}, \quad \mu_- \approx \mu_0^2 \frac{H + \lambda N \mu_+}{T} .$$

Дифференцируя эти выражения по магнитному полю, получим

$$\left(\frac{\partial \mu_+}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0} = \frac{\mu_0^2}{T}\left\{1 + \lambda N \left(\frac{\partial \mu_-}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0}\right\}, \quad \left(\frac{\partial \mu_-}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0} = \frac{\mu_0^2}{T}\left\{1 + \lambda N \left(\frac{\partial \mu_+}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0}\right\},$$

откуда имеем

$$\left\{\left(\frac{\partial \mu_+}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0} + \left(\frac{\partial \mu_-}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0}\right\} = \frac{2\mu_0^2}{T} + \frac{\lambda N \mu_0^2}{T}\left\{\left(\frac{\partial \mu_+}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0} + \left(\frac{\partial \mu_-}{\partial H}\right)_{T,P,H\to 0}\right\}.$$

Используя далее определения температуры перехода Θ и восприимчивости, приходим к выражению

$$\chi = \frac{2N\mu_0^2}{T + \Theta} .$$

Легко видеть, что выражение для магнитной восприимчивости антиферромагнетика внешне похоже на такое же выражение для восприимчивости ферромагнетика,

$$\chi = \frac{N\mu_0^2}{T - \Theta} .$$

Оно отличается численным множителем и знаком перед температурой перехода. И именно в этом знаке заключается коренное отличие – нет расходимости в точке фазового перехода. Есть, однако, излом производной по температуре от восприимчивости, который может быть достаточно просто посчитан. Это значит, что фазовый переход в антиферромагнитное состояние все же должен ощущаться при измерении температурной зависимости магнитной восприимчивости антиферромагнетика.

Отметим, что в реальных кристаллах спины на подрешетках могут отличаться по величине, например, в случае, когда подрешетки вещества составляются разными сортами атомов. Иными словами, суммарный магнитный момент в основном состоянии кристалла не равняется нулю. Такие вещества называются ферримагнетиками. Следует также напомнить, что в реальных кристаллах преимущественное направление магнитных моментов в узлах решетки может не совпадать с направлением внешнего поля. Появляется понятие оси легкого намагничивания, связанной с кристаллографическим направлением. Вдоль этого направления располагается вектор спонтанного намагничивания при нулевой температуре и в пределе слабого внешнего электромагнитного поля $H \to 0$.

Флуктуации в ферромагнетиках. Применимость подхода Вейсса.

Как мы уже убеждались, теория среднего поля, как и теория фазовых переходов Ландау, неправильно описывает поведение магнетика в узкой окрестности точки перехода. Это происходит потому, что эти теории не учитывают флуктуаций, которые в окрестности точки перехода резко возрастают и играют тем самым определяющую роль. В этом разделе лекций мы попытаемся оценить влияние на фазовый переход корреляций магнитных узловых моментов. Однако прежде определим понятия дальнего и ближнего порядка для спиновых моделей магнетика. На самом деле, до сих пор, изучая магнетики ниже температуры перехода, находясь в упорядоченной магнитной фазе (несимметричной фазе), мы имели дело с системами с дальним порядком. Это отражалось тем обстоятельством, что в упорядоченной магнитной фазе магнитный момент в узле решетки не зависит от номера узла. Попытка «повернуть» этот магнитный момент, изменить его направление наталкивалась на сопротивление соседей. Но такая ситуация имеет место по отношению к любому узловому магнитному моменту в упорядоченной магнитной фазе. По этой причине выделенный узловой магнитный момент как бы «чувствует» наличие магнитных моментов во всех остальных узлах кристаллической решетки. Это и означает наличие в системе дальнего порядка. Но такой дальний порядок исчезает в точке перехода от несимметричной к симметричной фазе магнетика (или возникает при обратном переходе).

Ближний порядок связан с локальными флуктуациями спинов (магнитных моментов) на близких расстояниях. В теории среднего поля Вейсса такие флуктуации (ближние корреляции) не учитываются. Поэтому в приближении

Вейсса получается, что с исчезновением спонтанной намагниченности исчезает и взаимодействие магнитных моментов, то есть, исчезает ближний порядок,

$$\overline{\mu_i\mu_j} = \bar{\mu}_i\bar{\mu}_j = 0, \text{ если } \bar{\mu}_i = 0.$$

Однако понятно, что если имеет место магнитное упорядочение, то

$$\overline{\mu_i\mu_j} \neq 0$$

даже если $\bar{\mu}_i = 0$. Рассмотрим возможность реализации ближнего порядка в спиновой системе и оценим функцию, характеризующую этот порядок, а именно, корреляционную функцию $\overline{\mu_i\mu_j}$. Будем изучать корреляции при $T > \Theta$, то есть, со стороны симметричной фазы, где параметр порядка равняется нулю, $\bar{\mu}_i = 0$. Покажем, что в этом случае $\overline{\mu_i\mu_j} \neq 0$. Выделим два каких-либо соседних магнитных моментов и оценим корреляцию $\overline{\mu_1\mu_2}$. Пусть один из этих моментов, например, μ_1 имеет значение $+\mu_0$. Тем самым мы по сути потребовали, чтобы $\overline{\mu_1\mu_2} = \overline{\mu_0\mu_2} = \mu_0\bar{\mu}_2$. Используем далее для рассмотрения ту же идею самосогласованного (среднего) поля.

Будем также считать, что внешнее поле отсутствует. На момент μ_2 действует поле, создаваемое моментом μ_1 и остальными моментами

$$\hat{H}_2 = \hat{\mu}_1 J_{21} + \sum_{j\neq 1} J_{2j}\hat{\mu}_j .$$

Среднее значение этого поля определяется выражением

$$H_{eff} = \mu_0 J_{21} + \sum_{j\neq 1} J_{2j}\bar{\mu}_j = \mu_0 J_{21} + \frac{1}{\mu_0}\sum_{j\neq 1} J_{2j}\mu_0\bar{\mu}_j = \mu_0 J_{21} + \frac{1}{\mu_0}\sum_{j\neq 1} J_{2j}\,\overline{\mu_1\mu_j} .$$

Как только мы написали такое поле, сразу же можем выписать уже привычное для нас уравнение Вейсса, но для $\overline{\mu_1\mu_2}$

$$\overline{\mu_1\mu_2} = \mu_0^2 th\left(\frac{\mu_0^2 J_{21} + \sum\limits_{j\neq 1} J_{2j}\,\overline{\mu_1\mu_j}}{T}\right).$$

Введем теперь обозначение $\overline{\mu_1\mu_j} \equiv g\left(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_j\right)$. Тогда уравнение может быть записано в виде:

$$g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\right)=\mu_0^2 th\left(\frac{\mu_0^2 J_{21}\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\right)+\sum\limits_{j\neq 1} J_{2j}\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)}{T}\right).$$

В приближении Вейсса искомая функция $g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)$ равна нулю. Из выписанного уравнения видно, однако, что существует нетривиальное решение. В самом деле, в простом случае

$$\left|g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)\right|\ll\mu_0^2,\quad \sum_{j\neq 1} J_{2j}\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)\ll\Theta$$

(последнее неравенство может быть справедливо по той причине, что температура перехода пропорциональна числу узлов или ближайших соседей, таким образом, оно выполняется тем лучше, чем больше число ближайших соседей) мы можем разложить тангенс гиперболический в ряд по малому аргументу:

$$g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\right)=\mu_0^2\frac{\mu_0^2 J_{21}\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_2\right)+\sum\limits_{j\neq 1} J_{2j}\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)}{T}.$$

Разлагая далее входящие в это уравнение функции в ряд Фурье и считая, что взаимодействие между моментами зависит только от расстояния между ними

$$J_{2j}\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)=J_{2j}\left(\mathbf{r}_j-\mathbf{r}_1\right),$$

придем к следующему уравнению для образов Фурье функций $g\left(\mathbf{r}_1-\mathbf{r}_j\right)$

$$\frac{T}{\mu_0^2}g(\mathbf{q})=\mu_0^2 J(\mathbf{q})+g(\mathbf{q})J(\mathbf{q}),$$

решение которого имеет вид

$$g(\mathbf{q})=\frac{\mu_0^4 J(\mathbf{q})}{T-\mu_0^2 J(\mathbf{q})},\qquad T>\Theta.$$

В длинноволновом пределе $(q\to 0)$ $J(\mathbf{q})\to J(0)=\lambda N$. Учитывая, что $\Theta\equiv\mu_0^2\lambda N$, получим

$$g(\mathbf{q})=\frac{\mu_0^4 J(\mathbf{q})}{T-\mu_0^2 J(\mathbf{q})}\to\frac{\mu_0^2\Theta}{T-\Theta}.$$