Zadania z Kwantowej Teorii Ciała Stałego

Zestaw VI – na 23.01.2003

18. Rozważyć układ spinów atomowych opisany hamiltonianem:

$$H = -{\sum_{ij}}' J_{ij} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - g\mu_B \mathbf{H}_a \cdot \sum_i \mathbf{S}_i, \tag{12}$$

gdzie g oznacza atomowy czynnik żyromagnetyczny, μ_B – magneton Bohra, $\mathbf{H}_a$ – zewnętrzne pole magnetyczne, zaś ${\sum_{ij}}' \equiv \sum_{i\neq j}$.

a) Wprowadzić *lokalny operator pola efektywnego*

$$\mathbf{H}_i = \frac{1}{g\mu_B} \sum_{j(i)} J_{ij} \mathbf{S}_j + \mathbf{H}_a$$

i zapisać za jego pomocą hamiltonian (12), a następnie zastosować przybliżenie średniego pola:

$$H = -g\mu_B \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{H}_i \approx -g\mu_B \sum_i \mathbf{S}_i \cdot \langle \mathbf{H}_i \rangle \equiv H_{\mathrm{MF}}.$$

Znaleźć poziomy energetyczne hamiltonianu średniopolowego H_{MF}.

b) Obliczyć funkcję rozdziału Z_i dla spinu S_i. W rachunku zastosować wzór:

$$\sum_{n=-S}^{S} \left(e^{-x}\right) = e^{x} \frac{1 - e^{-x(2S+1)}}{1 - e^{-x}},$$

gdzie $x \equiv \beta g\mu_B H_i$. Wyliczyć także energię swobodną na węzeł $F_i = -k_B T \ln Z_i$.

c) Poprzez różniczkowanie energii swobodnej obliczyć średni moment magnetyczny na węzeł $M_i = g\mu_B \langle S_i^z \rangle = -\partial F_i / \partial H_a$ i wyprowadzić równanie samozgodne dla spinów:

$$\langle S_i^z \rangle = S B_S \left(\beta S \sum_{j(i)} J_{ij} \left\langle S_j^z \right\rangle + \beta g\mu_B H_a \right), \tag{13}$$

gdzie *funkcja Brillouina* B_S jest zdefiniowana wzorem:

$$B_S(y) = \frac{2S+1}{2S} \coth\left(\frac{2S+1}{2S} y\right) - \frac{1}{2S} \coth\left(\frac{y}{2S}\right).$$

d) Zakładając jednorodne namagnesowanie próbki $\langle S_i^z \rangle \approx \langle S^z \rangle$ i stosując rozwinięcie $\coth x = x^{-1} + x/3 + \ldots$, wyprowadzić z równania samozgodnego (13) prawo *Curie-Weissa* dla magnetyzacji:

$$M = g\mu_B \langle S^z \rangle = \frac{C_M}{T - \theta} H_a,$$

gdzie *stała Curie* C_M i *temperatura Curie* θ są zdefiniowane wzorami:

$$C_M = \frac{1}{3k_B} (g\mu_B)^2 S(S+1), \qquad \theta = \frac{1}{3k_B} J_0 S(S+1).$$