

## Лекция 16.

**Термодинамика ферромагнетика. Температурное поведение теплоёмкости и макроскопического магнитного момента. Ферромагнетизм как пример фазового перехода 2-го рода.**

$$\Delta E(T) \equiv \langle \langle \Delta E \rangle \rangle = \sum_i w_i \sum_q \varepsilon(q) \langle i | \hat{N} | i \rangle = \sum_q \varepsilon(q) \overline{n_q} \quad n_q \text{ - число «отклонений» от}$$

максимальной проекции в системе:

$$n_q = 0, 1, 2, \dots \quad 0 \text{ - ни один}$$

не повернут, 1 - один повернут.

$$\overline{n_q} = \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(q)}{kT}} - 1} \quad \text{распределение Планка (фиксированных состояний нет} \Rightarrow \text{хим.}$$

потенциал=0)

(число квантов не фиксировано)

$$\Delta E(T) = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{\varepsilon(q)}{e^{\frac{\varepsilon(q)}{kT}} - 1} \cong \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int d^3q \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} =$$

$T \gg 0$ ; наличие  $\exp$  выделяет малые  $q$ , т.е. вклад дают  $\varepsilon(q) \leq kT$ , остальные «зарезаются»

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{q'} 4\pi q^2 dq \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} \xrightarrow{H=0 \Rightarrow \Delta=0} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} =$$

$q'$  определяется неравенством  $\varepsilon(q) \leq kT$ ; при этом выполняется длинноволновое приближение.

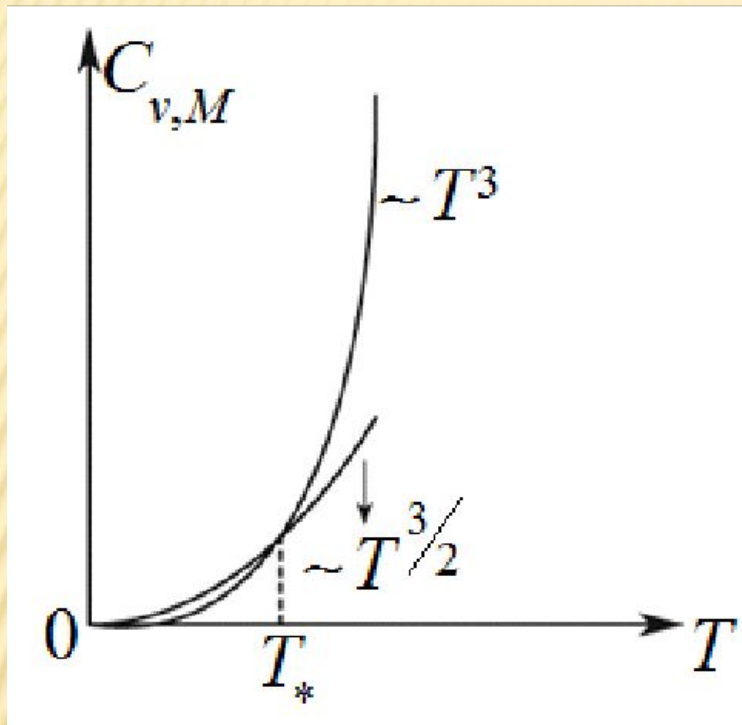
$$z = \frac{aq^2}{kT}; q^2 = \frac{kT}{a} z; q = \sqrt{\frac{kT}{a}} \sqrt{z}; dq = \sqrt{\frac{kT}{a}} \frac{dz}{2\sqrt{z}}$$

$$= \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{\frac{aq'^2}{kT} \approx 1} \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{1}{2}} \frac{dz}{2\sqrt{z}} \cdot \frac{a\left(\frac{kT}{a}\right)^2 z^2}{e^z - 1} = \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{5}{2}} \frac{a}{2} \int_0^{\frac{aq'^2}{kT} \approx 1} dz \frac{z^{\frac{3}{2}}}{e^z - 1} = \gamma \cdot \left(\frac{k}{a}\right)^{\frac{5}{2}}$$

таким образом,

$$E(T \gg 0, H \gg 0) \approx \gamma (kT)^{\frac{5}{2}}$$

$$C_V(T \gg 0, H = 0) \approx T^{\frac{3}{2}}$$



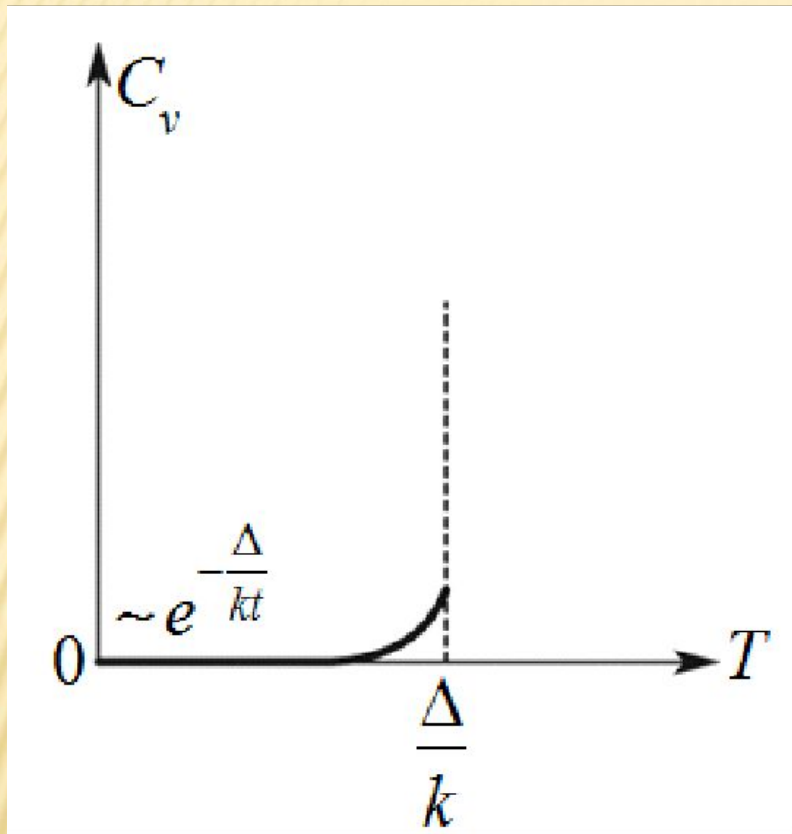
Легче родить фонон при таком законе дисперсии ( $aq^2 \dots$ ), чем при линейном.  
 Подводимое тепло в основном расходуется на рождение магнонов.

$e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}}$  велико даже при  $q = 0 \rightarrow (e^{\frac{\Delta}{kT}})$

и  $\forall$  добавка  $aq^2$  только усугубит это настроение

$$\xrightarrow{\frac{H \neq 0, kT < 0}{2}} \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int_0^{q'} 4\pi q^2 dq \frac{aq^2 + \Delta}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} \boxtimes \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \Delta e^{-\frac{\Delta}{kT}} \int_0^q dq \cdot q^2 \equiv \gamma_1 \cdot e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$

$$C_v(T \gg 0, H) \approx e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$



Возбуждения родиться не могут.

Еще одна термодинамическая величина – магнитный момент:

$$M^z = \sum_n g \mu_B S_n^z \approx g \mu_B \sum_n \left\{ S - \frac{1}{N} \sum_{q, q_1} a_{q_1}^\dagger a_q \exp(i(q_1 - q_0)n) \right\} =$$

$$= g\mu_B \sum_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}} - g\mu_B \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{q}, \mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}_1} a_{\mathbf{q}} \sum_{\mathbf{q}_2} e^{i(\mathbf{q}_1 - \mathbf{q}) \cdot \mathbf{q}_2} = M_0^z - \Delta M^z,$$

магнитный  
момент в  
отсутствии  
отклонений

поправка за счет  
бегающих спиновых  
волн

Причем  $\Delta M^z = g\mu_B \sum_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} a_{\mathbf{q}} = g\mu_B \sum_{\mathbf{q}} N_{\mathbf{q}}$

Таким образом, момент уменьшается в меру наличия спиновых волн

$$\overline{M^z} = M_0^z - \Delta M^z$$

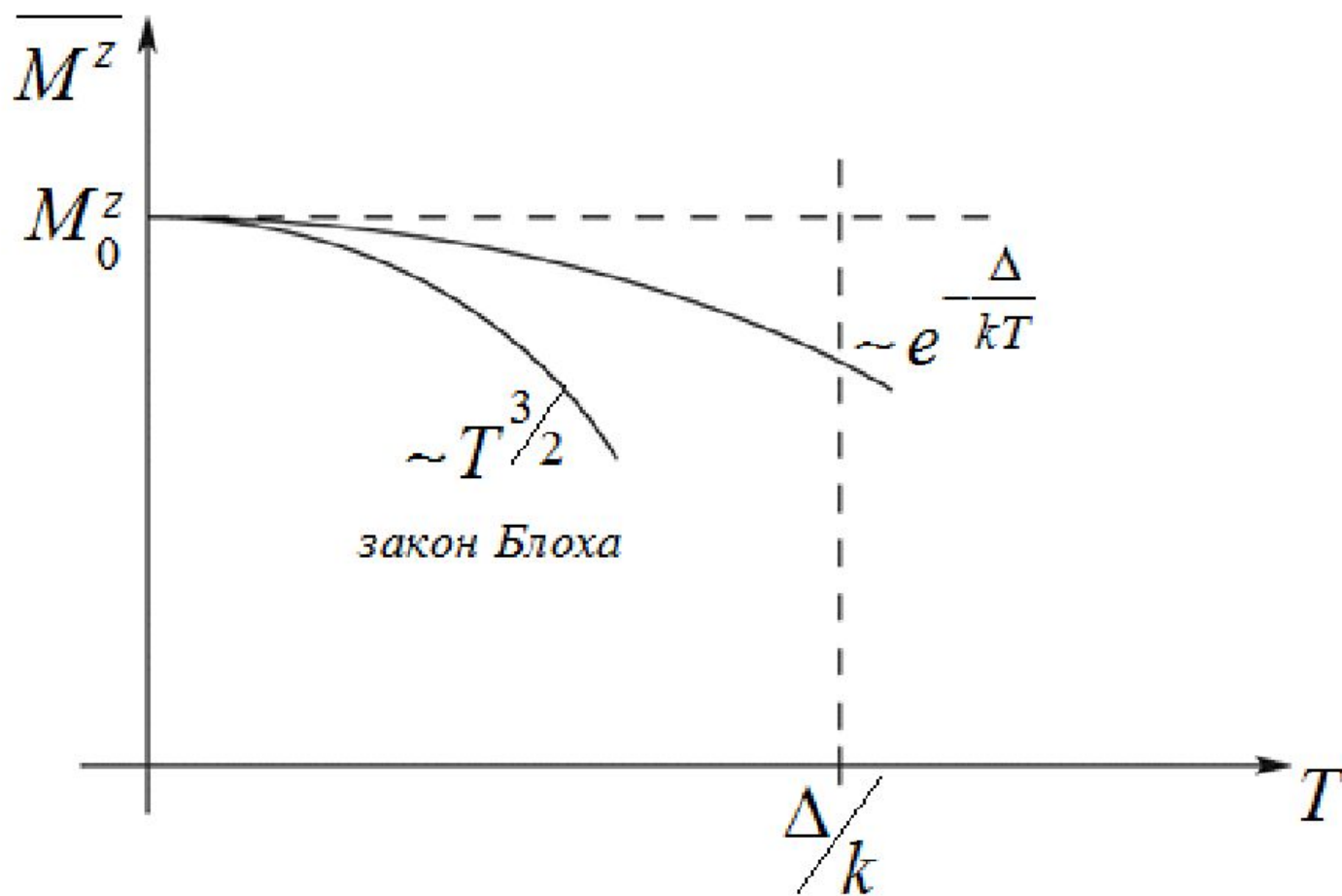
$$\overline{M_z} = M_0^z - \overline{\Delta M_z} = M_0^z - g\mu_B \sum_{\mathbf{q}} \overline{n_{\mathbf{q}}}$$

отсюда  $\overline{\Delta M^z} = g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \int dq \cdot q^2 \cdot 4\pi \frac{1}{e^{\frac{\varepsilon(q)}{kT}} - 1} = g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{q^2}{e^{\frac{aq^2 + \Delta}{kT}} - 1} =$

$\Delta = 0$  (без поля)

$$= g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^{q'} dq \frac{q^2}{e^{\frac{aq^2}{kT}} - 1} \approx g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \left(\frac{kT}{a}\right)^{\frac{3}{2}} \cdot \frac{1}{2} \int_0^{\frac{aq'^2}{kT} \rightarrow \infty} dz \frac{\sqrt{z}}{e^z - 1} \approx \gamma (kT)^{\frac{3}{2}}$$

Температура вызывает “разбалтывание” магнитных моментов.



$\Delta \neq 0$

$$\boxtimes g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} 4\pi \int_0^q dq \frac{q^2}{e^{\frac{\Delta}{kT}} - 1} \boxtimes g\mu_B \frac{\Omega}{(2\pi)^3} \frac{q^3}{3} e^{-\frac{\Delta}{kT}}$$

Магнитное поле, таким образом, стабилизирует магнитный момент. Рассмотрим двумерный кристалл (XY) в магнитном поле (Z).  $M_0^z$  не зависит от мерности кристалла, это просто полное число магнитных моментов атомов;

$$\overline{\Delta M^z} = g\mu_B \sum_q \bar{n}_q = g\mu_B \frac{S}{(2\pi)^2} \int dq \cdot q \cdot 2\pi \frac{1}{e^{\frac{aq^2}{kT}} - 1} \quad \square$$

$$\Delta = 0$$

$$\square g\mu_B \frac{S}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi \int_0^{q'} dq \frac{q}{e^{\frac{aq^2}{kT}} - 1} \quad \square g\mu_B \frac{S}{2\pi} \int_0^{q'} dq \frac{q}{\chi + \frac{aq^2}{kT} + \dots - \chi} \quad \square$$

основной конечный вклад дают  $aq^2 \leq kT \quad \square \quad 0$  можно разложить экспоненту

$$\square g\mu_B \frac{S}{2\pi} \frac{kT}{a} \int_0^{q'} \frac{dq}{q} \quad \square g\mu_B \frac{S}{2\pi} \frac{kT}{a} \ln |q'| \Big|_0^{q'} \quad \square T \ln L \rightarrow \infty$$

$$\lim_{q \rightarrow 0} \ln \frac{q'}{q} = \ln \frac{q'}{q_{\min}}, \quad q_{\min} = \frac{2\pi}{L}$$

при малейшем увеличении температуры двумерный ферромагнетик оказывается неустойчивым ( ферромагнетизм исчезает).

Таким образом, главную роль в поведении такой системы играют флуктуации – длинноволновые флуктуации с малыми  $q$ .

$$H \neq 0 \rightarrow \Delta \neq 0$$

$$kT < \Delta$$

$$\int g\mu_B \frac{S}{(2\pi)^2} \cdot 2\pi e^{-\frac{\Delta}{kT} q} dq \cdot q e^{-\frac{\Delta}{kT}} \quad \text{пока } T < \frac{\Delta}{k}, \text{ магнитное поле замораживает}$$

магнитный момент.

$$kT \ll \Delta \rightarrow \frac{\Delta N}{N} \ll 1$$

С ростом температуры число основных спиновых волн растет, они начинают взаимодействовать, спины отклоняются более, чем на 1. Возникает некое усредненное состояние, созданное магнитным полем и спиновыми волнами.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{n \neq m} I_{nm} (S_n S_m) - g\mu_B H \sum_n S_n^z = -\sum_n \left( \sum_m I_{nm} S_m^z + g\mu_B H \right) S_n^z = -g\mu_B \sum_n H_n S_n^z$$

с учетом взаимодействия

$$H_n = \frac{1}{g\mu_B} \sum_m I_{nm} S_m^z + H$$



Заменяем истинное мгновенное значение на каждом узле на некое усредненное значение поля:

$$H_n \rightarrow \langle H \rangle \equiv \frac{1}{g\mu_B} \left( \sum_m I_{nm} \right) \langle S^z \rangle + H, \quad \text{где } \langle S^z \rangle - \text{усредненная по всем значениям}$$

проекция спина на узле

$$\langle S^z \rangle \equiv \frac{\langle H \rangle - H}{\left( \frac{I}{g\mu_B} \right)}$$

Среднее значение определяется распределением Гиббса:

$$w(S^z) = \frac{1}{Z} e^{-\frac{(-M_z \langle H \rangle)}{kT}}, \quad M^z = g\mu_B S^z, \quad -S \leq S^z \leq +S$$

$$\begin{aligned} \langle S^z \rangle &= \sum_{S^z=-S}^{+S} S^z w(S^z) = \frac{1}{Z} \sum_{S^z=-S}^{+S} S^z e^{-\frac{g\mu_B \langle H \rangle S^z}{kT}} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial a} \sum_{S^z=-S}^{+S} e^{aS^z} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial a} \frac{(1 - e^{a(2S+1)})}{1 - e^a} = \\ &= \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\left[ e^{-a\left(S+\frac{1}{2}\right)} - e^{a\left(S+\frac{1}{2}\right)} \right] \frac{1}{2}}{\frac{1}{2} \left[ e^{-\frac{a}{2}} - e^{\frac{a}{2}} \right]} = \frac{1}{Z} \frac{\partial}{\partial a} \frac{\text{sh}\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right)}{\text{sh}\frac{a}{2}} = \\ &= \frac{1}{Z} \left\{ \frac{1}{\text{sh}\frac{a}{2}} \left( S + \frac{1}{2} \right) \text{ch}\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) - \text{sh}\left(a\left(S+\frac{1}{2}\right)\right) \frac{\text{ch}\frac{1}{2}}{2\text{sh}^2\frac{a}{2}} \right\} \end{aligned}$$

$$z = \sum_{S^z=-S}^S e^{aS_z} = \frac{e^{-aS} (1 - e^{a(2S+1)})}{1 - e^a} = \frac{sh \left( a \left( s + \frac{1}{2} \right) \right)}{sh \frac{a}{2}}$$

таким образом,

$$\langle S^z \rangle = \frac{sh \frac{a}{2}}{sh \left( a \left( s + \frac{1}{2} \right) \right)} \left\{ \frac{s + \frac{1}{2}}{sh \frac{a}{2}} ch \left( a \left( s + \frac{1}{2} \right) \right) - \frac{1}{2} sh \left( a \left( s + \frac{1}{2} \right) \right) \frac{ch \frac{a}{2}}{sh^2 \frac{a}{2}} \right\} = \left( s + \frac{1}{2} \right) cth \left( a \left( s + \frac{1}{2} \right) \right) -$$

$$\frac{\langle S^z \rangle}{s} = \left( 1 + \frac{1}{2s} \right) cth \left( as \left( 1 + \frac{1}{2s} \right) \right) - \frac{1}{2s} cth \left( \frac{1}{2s} as \right) = \frac{g\mu_B}{IS} \{ \langle H \rangle - H \} \square$$

$$as = \frac{g\mu_B \langle H \rangle}{kT} s \equiv y \rightarrow \text{трансцендентное уравнение}$$

$$\square \frac{g\mu_B \langle H \rangle}{IS} - \frac{g\mu_B}{IS} H = \frac{kT}{IS^2} y - \frac{g\mu_B}{IS} H = \left( 1 + \frac{1}{2s} \right) cth \left( y \left( 1 + \frac{1}{2s} \right) \right) - \frac{1}{2s} cth \frac{y}{2s}$$

$$\gamma(T) \equiv \frac{kT}{IS^2}; \alpha \equiv \frac{g\mu_B}{IS}$$

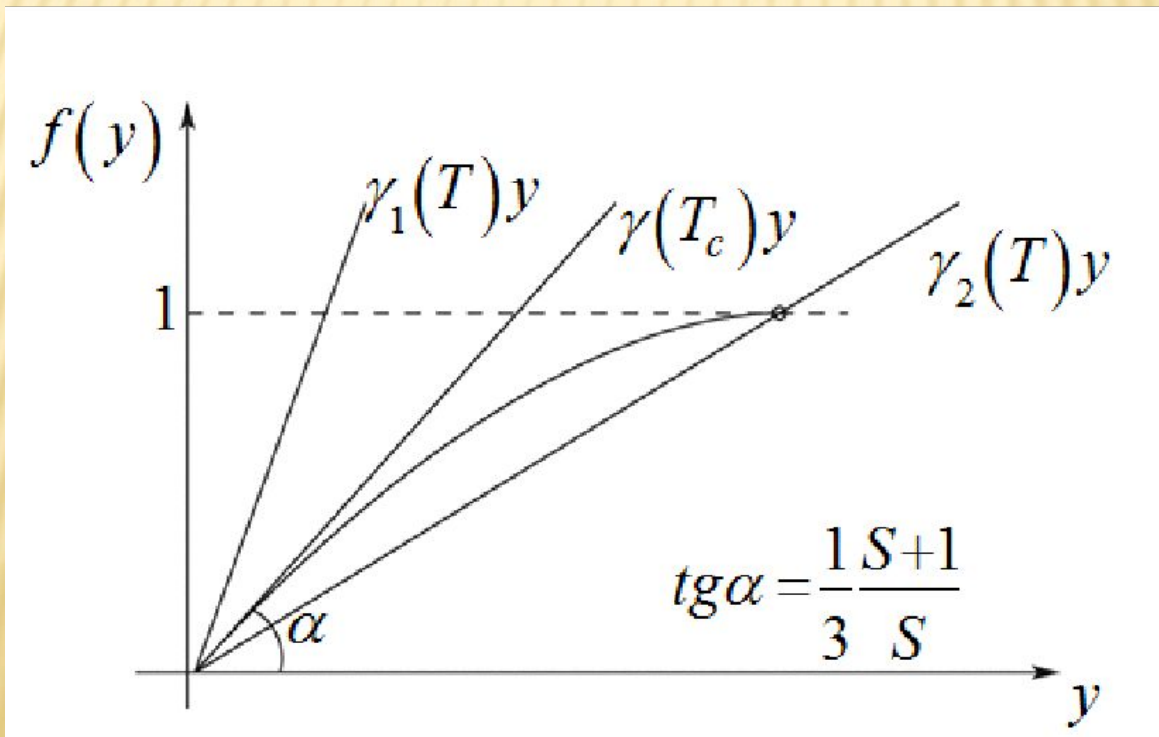
$$\gamma(T)y - \alpha H = \left(1 + \frac{1}{2s}\right) \text{cth} \left( y \left(1 + \frac{1}{2s}\right) \right) - \frac{1}{2s} \text{cth} \frac{y}{2s} \equiv f(y) \quad \text{функция Ланжевена}$$

$$y \rightarrow \infty, \text{cth} \rightarrow 1$$

$$1) \quad f(y \rightarrow \infty) = 1 + \frac{1}{2s} - \frac{1}{2s} = 1$$

$$y \rightarrow 0$$

$$2) \quad \text{cthx} \Big|_{x \rightarrow 0} \approx \frac{1}{x} + \frac{x}{3} + \frac{x^3}{45}$$



$$\begin{aligned}
f(y \boxtimes 0) &\approx \left(1 + \frac{1}{2s}\right) \left\{ \frac{1}{y \left(1 + \frac{1}{2s}\right)} + \frac{1}{3} y \left(1 + \frac{1}{2s}\right) - \frac{1}{45} y^3 \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^3 + \dots \right\} - \\
&-\frac{1}{2s} \left\{ \frac{2s}{y} + \frac{1}{3} \frac{y}{2s} - \frac{1}{45} y^3 \left(\frac{1}{2s}\right)^3 + \dots \right\} \approx \\
&\approx \frac{1}{y} + \frac{y}{3} \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^2 - \frac{1}{45} y^3 \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^4 + \dots - \frac{1}{y} - \frac{y}{3} \left(\frac{1}{2s}\right)^2 + \frac{1}{45} y^3 \left(\frac{1}{2s}\right)^4 + \dots \approx \\
&\approx \frac{y}{3} \left[ \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^3 - \left(\frac{1}{2s}\right)^2 \right] - \frac{y^3}{45} \left[ \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^4 - \left(\frac{1}{2s}\right)^4 \right] + \dots = \\
&= \frac{y}{3} \left(1 + \frac{1}{3}\right) - \frac{y^3}{45} \left[ \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^2 - \left(\frac{1}{2s}\right)^2 \right] \left(1 + \frac{1}{s}\right) \approx \frac{y}{3} \frac{s+1}{s} - g y^3 \\
g &\equiv \frac{1}{45} \frac{s+1}{s} \left[ \left(1 + \frac{1}{2s}\right)^2 + \left(\frac{1}{2s}\right)^2 \right] > 0
\end{aligned}$$

$$\boxed{a) H = 0} \quad \gamma(T) \cdot y \quad \gamma_1(T) > \gamma(T_c) > \gamma_2(T) \Rightarrow T_1 > T_c > T_2$$

1) если  $T > T_c$ , то единственное решение -  $y = 0$ ;

$$2) \text{ если } T = T_c \rightarrow \gamma(T_c) y = \frac{y}{3} \frac{s+1}{s}; \quad \frac{kT_c}{IS^2} = \frac{1}{3} \frac{s+1}{s}.$$

Тогда  $kT_c = \frac{Is(s+1)}{s}$ , в точке  $T = T_c$  впервые возникает ненулевая средняя намагниченность.

$T_c \approx 10^3 \text{ K}$  - температура Кюри.

$$\frac{S(S+1)}{3} = \frac{\hbar^2 S^2}{3} - \text{средний квадрат спина, приходящийся на одну из осей};$$

3)  $T < T_c$ : есть точное решение, которое можно найти, раскладывая  $f(y)$  дальше.

$$\frac{kT}{IS^2} y = \frac{\langle S^z \rangle}{S} \boxtimes \frac{1}{3} \frac{S+1}{S} y - gy^3 \quad g > 0!$$

Введем  $\boxtimes g = g \left( \frac{IS^2}{kT} \right)^3$ .

Имеем:  $\frac{\langle S^z \rangle}{S} \approx \frac{T_c}{T} \frac{\langle S^z \rangle}{S} - \boxtimes g \left[ \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right]^3$

$$\boxed{\frac{\langle S^z \rangle}{S} \left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) \boxtimes - \boxtimes g \left[ \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right]^3}$$

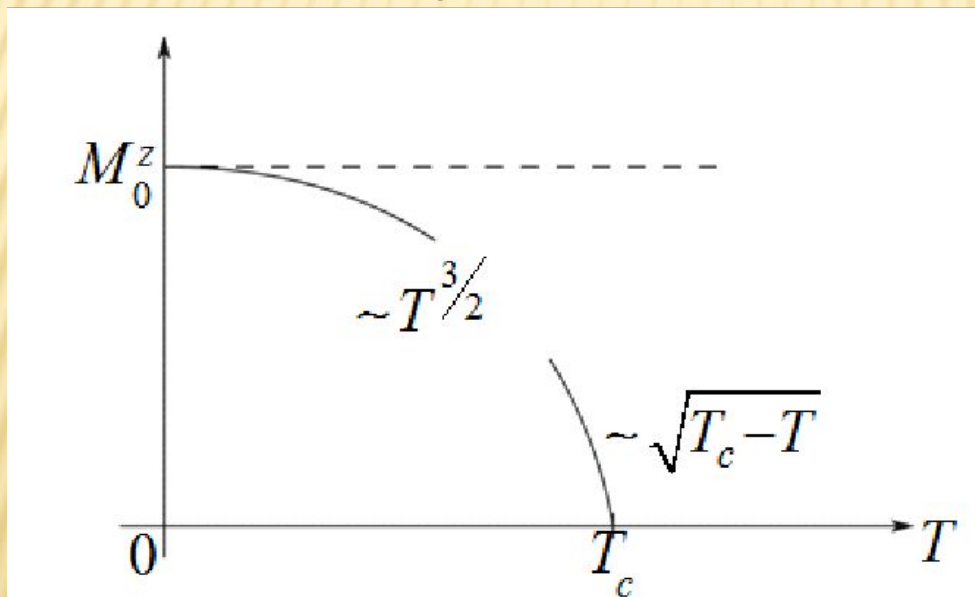
1) если  $T > T_c$ , то  $\left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) > 0$ , а в правой части – отрицательная величина, равенство

возможно только при  $\langle S^z \rangle = 0$ .

2) если  $T < T_c \rightarrow \left( \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^2 \cong \frac{T_c - T}{gT_c}$ , вблизи точки перехода заменяем  $T$  на  $T_c$ .

Получаем:  $\left. \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right|_{T \leq T_c} \cong \sqrt{\frac{T_c - T}{gT_c}}$ .

$M^z \cong g\mu_A NS \left. \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right|_{T \leq T_c} \cong \sqrt{T_c - T} \text{ (!!!)}$



Т.е. левее  $T_c$  вещество имеет средний момент, отличный от нуля, и является ферромагнетиком. Правее – парамагнетиком.

Фазовые переходы, при которых исчезает параметр упорядочения, называются фазовыми переходами второго рода.

Термодинамический потенциал Гиббса

$$\Phi(p, T; M) \Big|_{T=T_c} \approx \Phi_0(p, T) + \frac{A}{2} M^2 + \frac{B}{4} M^4 + \dots \quad \text{истинный скаляр;}$$

$\Delta\Phi$

Разлагаем по вектору  $\Rightarrow$  входят только четные степени.

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial M} = 0 \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial M^2} \geq 0 \end{cases} \quad \text{для равновесного состояния (уравнение экстремума).}$$

$$\begin{cases} \frac{\partial \Phi}{\partial M} = AM + BM^3 = M(A + BM^2) = 0 \\ \frac{\partial^2 \Phi}{\partial M^2} = A + 3BM^2 > 0 \end{cases} \Rightarrow$$



1)  $M = 0 \quad A > 0 (!) \rightarrow T > T_c$  отсутствие упорядочения

$$A + 3B \left( -\frac{A}{B} \right) = -2A > 0 \rightarrow A < 0$$

$$2) M^2 = -\frac{A}{B} \quad (A < 0, B > 0) \rightarrow T < T_c$$

При переходе через  $T_c$   $A$  меняет знак, предположим  $A \approx a(T - T_c)$ ,  $a > 0$

$$T < T_c \quad M^2 = \frac{a(T_c - T)}{B}, \quad M \approx \sqrt{T_c - T} \text{ - получили тот же закон, который получался}$$

из приближения среднего поля.

Таким образом, переход ферромагнетик  $\rightarrow$  парамагнетик действительно является фазовым переходом второго рода.

$$S = -\frac{\partial \Phi}{\partial T} = -\frac{\partial \Phi_0}{\partial T} - \frac{\partial \Delta \Phi}{\partial T} = S_0 + \Delta S$$

$$-\frac{\partial \Delta \Phi}{\partial T} = \left\{ \begin{array}{l} 0, T > T_c \quad (M = 0!!) \\ -\frac{\partial}{\partial T} \left\{ \frac{1}{2} a (T - T_c) \frac{a (T - T_c)}{B} + \frac{B (a (T - T_c))^2}{4 B^2} \right\}, T < T_c \end{array} \right.$$

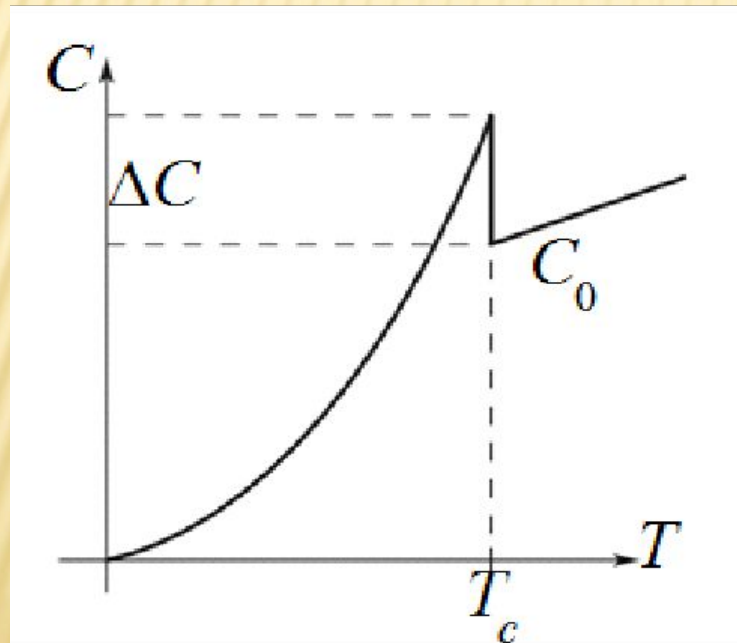
$$\Delta S = -\frac{\partial \Delta \Phi}{\partial T} = \left\{ \frac{a^2}{2B} \left[ \frac{\partial}{\partial T} (T - T_c)^2 \right] + \frac{a^2}{4B} \left[ -\frac{\partial}{\partial T} (T - T_c)^2 \right] \right\} =$$

$$= \frac{a^2}{2B} \cdot 2(T - T_c) - \frac{a^2}{4B} \cdot 2(T - T_c) = -\frac{a^2}{2B} (T - T_c) < 0!!$$

$\Delta S < 0$  состояние при  $T < T_c$  более упорядочено.

Теплоемкость  $C = T \frac{\partial S}{\partial T} = C_0 + \Delta S,$

$$\Delta C = T \frac{\partial \Delta S}{\partial T} = T \left( -\frac{a^2}{2B} (-1) \right) \approx \frac{a^2}{2B} T_c$$



$\lambda$  - точка (точка перехода, где происходит фазовый переход второго рода).

Дополнительная теплоемкость уходит на оставшуюся часть выстроенных магнитных моментов (их разбалтывание).

$$\boxed{\dot{a}) H \neq 0}$$

$$\frac{\langle S^z \rangle}{S} - \alpha H \boxtimes \frac{\langle S^z \rangle}{S} \cdot \frac{T_c}{T} - g \left( \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^3$$

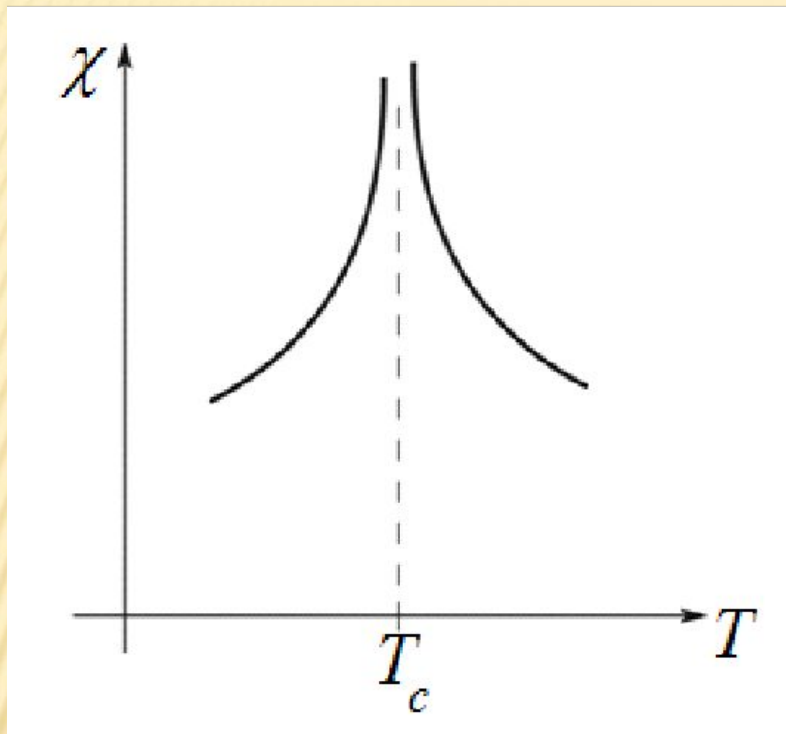
$$\frac{\langle S^z \rangle}{S} \left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) + g \left( \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^3 \boxtimes \alpha H \rightarrow \frac{\langle S^z \rangle}{S} \neq 0$$

Никакого перехода второго рода в точке  $T_c$  нет. Магнитное поле “замораживает” систему с ненулевым моментом.

В магнитном поле переход будет фазовым переходом первого рода (как только мы нагреем систему настолько, что ей выгоднее будет перейти в немагнитное состояние (перескочить создаваемую полем щель)).

$$\chi = \frac{\alpha}{\left( 1 - \frac{T_c}{T} \right) + 3g \left( \frac{\langle S^z \rangle}{S} \right)^2} = \begin{cases} \frac{\alpha T_c}{T - T_c}, T > T_c \boxtimes \langle S^z \rangle = 0 \\ \frac{\alpha}{\frac{T - T_c}{T_c} + 3g \frac{T_c - T}{3g(T_c - T)}} = \frac{\alpha T_c}{2(T_c - T)}, T < T_c \end{cases}$$

$\boxtimes$  восприимчивость



Разрывность есть следствие того, что мы применяли теорию среднего поля.

Флуктуации магнитного момента в окрестности точки фазового перехода огромны и охватывают почти все вещество, если бы их мы учли (учли бы градиент момента в разложении), то расходимости бы не было.

Возникает аномальный вклад длинноволновых флуктуаций (вблизи точки перехода).

Трудность выполнения законов сохранения энергии и волнового вектора для распада длинноволновых возбуждений приводит к тому, что длинноволновые возбуждения долго живут (по сравнению с остальными)  $\Rightarrow$  большой вклад.