

1. Ising-modell

Az Ising-modell figyelembe veszi a szomszédos spinek közötti kölcsönhatást, egy (ferromágneses) rendszer energiája így:

$$E = -J \sum_{i,j} s_i s_j - H \sum_i s_i$$

A második összegzés csak azokra az i, j párokra értendő, amik elsőszomszédok. Az egyszerűség kedvéért tegyük fel, hogy csak két állapot lehetséges, tehát az atomok spinje: $s_i = \pm 1$. Az első tag a H nagyságú külső mágneses térrel vett kölcsönhatás, a második tag a szomszédos spinek közötti kölcsönhatás járuléka. Ferromágnesnél az a kedvező energiájú helyzet, ha a szomszédos spinek ugyanabba az irányba mutatnak, így a J együttható pozitív.

Természetesen a valóságban a távolabbi spinek között is lehet kölcsönhatás, az Ising-modellnek azonban jelentős előnye, hogy 1 és 2 dimenzióban egzaktul megoldható.

1.1. Az Ising-modell megoldása 1 dimenzióban

A határfeltétel lehet periodikus vagy nem. Az egyszerűség kedvéért periodikus határfeltételekkel számolunk (ez nem változtatja meg jelentősen a végeredményt), így a modellt úgy lehet elképzelni, hogy az N spin egy gyűrű mentén helyezkedik el. A rendszer energiája:

$$E = -J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} - H \sum_{i=1}^N s_i$$

A termodinamikai mennyiségek meghatározásához írjuk fel az állapotösszeget:

$$Z = \sum_{\{s_i\}} \exp \left(\beta J \sum_{i=1}^N s_i s_{i+1} + \beta H \sum_{i=1}^N s_i \right)$$

Az összegzés az összes elképzelhető spinkonfigurációra értendő. Az exponenciálist szorzattá lehet bontani, és a szorzást a sorozatokra vett összegzéssel fel lehet cserélni:

$$Z = \prod_{i=1}^N \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta J s_i s_{i+1} + \beta H (s_i + s_{i+1})/2}$$

Vezessük be két spin között a következő transzfermátrixot:

$$T_{s_i s_j} = e^{\beta J s_i s_j + \beta H (s_i + s_j)/2}$$

Mivel s_i és s_j értéke is ± 1 lehet, T egy 2×2 mátrix lesz:

$$T = \begin{pmatrix} e^{\beta J + \beta H} & e^{-\beta J} \\ e^{-\beta J} & e^{\beta J - \beta H} \end{pmatrix}$$

Ekkor az állapotösszeg felírható a transzfermátrixszal:

$$Z = \prod_{i=1}^N \sum_{s_i = \pm 1} T_{s_i s_{i+1}} = \text{Sp} \left(T^N \right) = \lambda_1^N + \lambda_2^N \approx \lambda_1^N$$

Az állapotösszeg a mátrix N -edik hatványának a spurja, ami kifejezhető a λ_1 és λ_2 sajátértékek hatványával. Mivel N nagyon nagy, ezért a kisebb sajátérték hatványa elhanyagolható a nagyobbhoz képest. A transzfermátrix sajátértékei: $\lambda_{1,2} = e^{\beta J} \pm \sqrt{e^{2\beta J} \operatorname{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}$. Ha nincs külső tér ($H = 0$), az állapotösszeg: $Z = 2^N \operatorname{ch}^N(\beta J)$. A mágnesezettség külső tér esetén:

$$M = \frac{\partial \ln Z}{\partial(\beta H)} = \frac{N e^{\beta J} \operatorname{sh}(\beta H)}{\sqrt{e^{2\beta J} \operatorname{sh}^2(\beta H) + e^{-2\beta J}}}$$

A korrelációs függvény: $c_k(r) = \langle s_k s_{k+r} \rangle = e^{-r/\xi}$, ahol $\xi = \frac{-1}{\ln \operatorname{th}(\beta J)}$.

1.2. Az Ising-modell átlagtérelmélete 2 dimenzióban

Az Ising-modell 2 dimenzióban is megoldható egzaktul, de ez nagyon bonyolult, ezért itt egy átlagtérelméleti közelítést mutatunk be. Az energia kifejezésében a spinváltókhöz adjuk hozzá és vonjuk is le a várható értéküket, jelölje ezt $m := \langle s_i \rangle$:

$$s_i s_j = (m + (s_i - m))(m + (s_j - m)) = m(s_i + s_j) - m^2 + (s_i - m)(s_j - m)$$

Az utolsó tag az átlagtól való eltérések szorzata, amit a továbbiakban elhanyagolunk, így nem lesz két spin szorzatát tartalmazó tagunk, a rendszer úgy kezelhető, mint egy szabad spinrendszer, amire az átlagos térnek megfelelő külső tér hat. Az energia így felírva:

$$E = \frac{1}{2} J q m^2 N - (H + J q m) \sum_i s_i$$

Itt q az elsőszomszédok száma, amit koordinációs számnak hívnak. Az állapotösszeg:

$$Z = e^{-\beta J q m^2 N/2} \sum_{\{s_i\}} e^{\beta(q J m + H) \sum_i s_i} = e^{-\beta J q m^2 N/2} \prod_i \sum_{s_i = \pm 1} e^{\beta(q J m + H) s_i} = e^{-\beta J q m^2 N/2} (2 \operatorname{ch}(\beta(q J m + H)))^N$$

Ebből kiszámítható a mágnesezettség várható értéke:

$$m = \langle s_i \rangle = \operatorname{th}(\beta(q J m + H))$$

A számolás alatt végig felhasználtunk egy m paramétert, mint átlagos mágnesezettséget, de ennek az értéke nem tetszőleges, hanem olyan, hogy a fenti egyenletet kielégíti. Az egyenletet érdemes grafikusán megoldani. Mindkét oldalt m függvényében ábrázolva, a baloldal egy 45° meredekségű egyenes, a jobb oldal egy tangens hiperbolikus függvény. A két görbe metszéspontjai az egyenlet megoldásai.

A tangensfüggvény meredeksége viszont függ a hőmérséklettől is, így egy kritikus hőmérséklet felett csak egy, alatta viszont három megoldás van. A kritikus hőmérséklet alatt az anyag viselkedése ferromágneses, felette paramágneses, a kritikus hőmérsékleten másodrendű fázisátalakulás játszódik le. Ha a külső tér 0, akkor az egyik megoldás mindig az origóban van, a másik két megoldás pedig szimmetrikusan helyezkedik el. Ha a külső tér nem 0, akkor a megoldások eltolódnak, elég nagy tér mellett már a ferromágneses fázisban is csak egy megoldás lesz.

A mágnesezettséget a külső tér függvényében ábrázolva (az alábbi ábra $\beta J q = 2$ paraméter mellett készült) S alakú görbét kapunk, egy kritikus külső tér érték felett már csak egy megoldás létezik, alatta három. A három megoldás közül azonban a középső instabil (a megoldások a szabadenergia szélsőértékeihez tartoznak, a két szélső megoldás

minimum, a középső maximum), így a külső teret mondjuk egy magas értékről egyre csökkentve a mágnesezettség a felső görbén marad, majd a visszafordulási pontot elérve leugrik az alsó ágra. A külső teret ismét növelve a mágnesezettség az alsó ág mentén haladva növekszik, majd a felső visszafordulási pontot elérve visszaugrik a felső ágra. A mágneses teret a közbülső részben hagyva előfordulhat, hogy a rendszer a termikus fluktuációk hatására átugrik az egyik helyről a másikra. Azokat a pontokat, ahol a mágnesezettség visszafordul, spinodális pontoknak nevezik. Ez a viselkedés a valódi ferromágneses anyagokban található hiszterézishez hasonló. Egy valódi anyag azonban sok doménből áll, amik kiolthatják egymás hatását, így be lehet menni vele a 0 mágnesezettség környezetébe is. Természetesen ez csak egy közelítő leírás, ami csak a viselkedés jellegét adja vissza, így a ferromágneses anyagok hiszterézise a részletekben eltér ettől.

A fázisátalakulás hőmérsékletét az határozza meg, hogy ott a θ függvény meredeksége az origóban (a biztos metszéspontban) éppen 1, így még csak egy metszéspont létezik. Ekkor $\beta_C = \frac{1}{qJ}$ vagyis $T_C = \frac{qJ}{k}$.

2. Mágneses anyagok típusai

A mágnesség tárgyalásánál előbukkantak a következő mennyiségek: Mágneses térerősség (H), mágneses indukció vektor (B), mágnesezettség (M). Bevezettük a mágneses szuszceptibilitást, mint anyagi jellemzőt és arányossági tényezőt:

$$\mathbf{B} = \mu_0(\mathbf{H} + \mathbf{M}) = \mu_0(1 + \chi_v)\mathbf{H} = \mu\mathbf{H}$$

Azaz a mágneses szuszceptibilitás a mágnesezettség és a mágneses térerősség közötti kapcsolat. A szuszceptibilitás lehet pozitív és negatív is, azaz külső mágneses térbe helyezve az anyagot, az vagy erősíti azt, csak csökkenti (a mágnes vonzza, vagy taszítja őket). Utóbbi esetben az anyag diamágneses, az előbbi esetben több mechanizmust különböztetünk meg. A diamágnesség okozói a belső lezárt elektronhéjakon levő elektronok, amelyek a megváltozással szemben hatnak a mágneses momentumuk térrel szembe állításával.

2.1. Atomi paramágnesség

Másnéven lokalizált paramágnesség. Tekintsük az összes impulzusmomentumot ($\mathbf{J} = \mathbf{L} + 2\mathbf{S}$), ekkor a mágneses momentum a következőképpen írható: $\vec{\mu} = -g\mu_B\mathbf{J}$. Tudjuk, hogy J mellékkvantumszám mellett a mágneses kvantumszám lehet $-J \leq m \leq +J$. B külső térben az energia a következő lesz: $E = -\vec{\mu}\mathbf{B}$. Ha feltesszük, hogy \mathbf{B} z irányú, akkor a $\mathbf{B}\mathbf{J}$ skaláris szorzatot helyettesíthetjük Bm szorzattal. Az energia ismeretében feltudjuk írni az állapotösszeget, azonban mivel az atomok függetlenek, elég egy atom járulékát vizsgálni:

$$\zeta = \sum_{m=-J}^J e^{-\beta g\mu_B B m}$$

Itt csak m -ben különböznek az állapotok, ezért a kitevő többi részére bevezetjük az x változót, ekkor az összeg egy véges geometriai sorba megy át. A felösszegzésre az eredmény:

$$\zeta = \frac{\text{sh}[(J + 1/2)x]}{\text{sh}(1/2x)}$$

Az egyrészecske-állapotösszeg ismeretében felírható a szabadenergia: $F = -NkT \ln \zeta$, amelyben B is paraméterként fog szerepelni és a $\partial F / \partial B$ fogja megadni a mágnesezettséget. Az eredményben a bonyolult kotangens-hiperbolikusok helyett bevezettük a

Brillouin-függvényt:

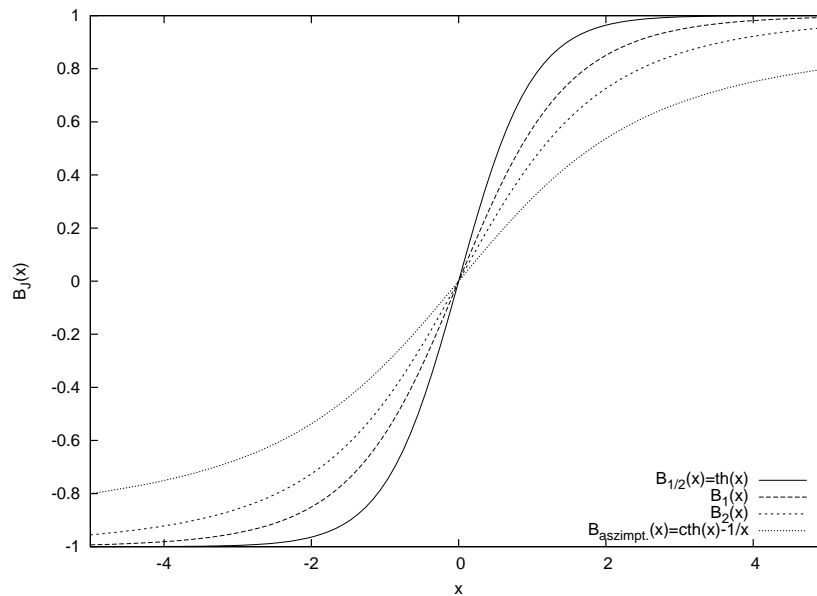
$$M = Ng\mu_B J \cdot B_J(J \cdot x)$$

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

A Brillouin-függvény alakra hasonló a $\operatorname{th}(x)$ -hez, a pozitív oldalon 1-hez, negatív oldalon -1 -hez tart. Ebből következik, hogy a maradék szorzófaktor a maximális mágnesezettséget adja meg, a függvény alakjából pedig a szaturáció jelnesége adódik, ami akkor következik be, amikor az összes mágneses momentumot egyirányba állítottuk be. Kiszámolhatjuk a függvény $x \ll 1$, azaz $B \rightarrow 0$ határesetét, amelyet behelyettesítve megkaphatjuk a szuszceptibilitást:

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H} = \frac{C}{T}$$

Ahol a számottevő mennyiségű konstanst a C Curie-állandóba vontuk össze. Ez a hőmérséklettel fordítottan arányos szuszceptibilitás függés a Curie-törvény.



1. ábra. A Brillouin-függvény néhány J -re, az aszimptotikus függvény a $J \rightarrow \infty$ eset

2.2. Atomi diamágnesség

Az atomi diamágnességet szemléletesen úgy magyarázzuk, hogy a külső mágneses tér hatására a keringő elektron pályája megváltozik úgy, hogy a Lenz-törvény értelmében a változást létrehozó hatást gyengítse. Vagyis a külső mágneses térrel ellentétes mágneses momentum indukálódik.

Keringjen az elektron r sugarú pályán, és vonzza a mag az elektront F erővel. Legyen ρ a sugár vetülete arra a síkra, amelyik a külső térre merőleges és átmegy a magon. Ha nincs külső mágneses tér, akkor igaz, hogy F szolgáltatja a körpályán maradáshoz szükséges centripetális erőt, vagyis

$$F = m\omega^2\rho$$

ahol ω a keringés szögsebessége. Ha ezek után B külső mágneses teret kapcsolunk az anyagra, akkor az elektronnak megváltozik a keringési frekje mert a Lorentz-erővel

együtt már más lesz a rá ható erők eredője. Ezért ekkor

$$F + e(\omega + \Delta\omega)\rho B = m(\omega + \Delta\omega)^2\rho$$

Mivel B kicsi, a bal oldalon a $\Delta\omega B$ tagot elhagyjuk, a jobb oldalon pedig elhagyjuk a másodrendűen kicsi $\Delta\omega^2$ -et, valamint kihasználjuk, a fenti egyenletet, így

$$e\omega\rho B = 2m\omega\Delta\omega\rho \Rightarrow \Delta\omega = \frac{eB}{2m}$$

Egy elektron köráramot képvisel, ami $I = e\omega/2\pi$. Most ennek a köráramnak a megváltozása $I = e\Delta\omega/2\pi$, az indukálódott mágneses momentum $\mu = -I\pi\rho^2 = -e\rho^2\Delta\omega/2$ (mínusz a Lenz-törvény miatt). Ha többféle távolságban vannak elektronok:

$$\mu_i = -\frac{e\Delta\omega\rho_i^2}{2}$$

$$\langle\mu\rangle = -\frac{e\Delta\omega\langle\rho^2\rangle}{2}$$

A mágneses momentumhoz csak a térirányához merőleges távolságok járulnak hozzá az elektron azonban r sugarú pályán kering, ez behoz még egy $3/2$ -es faktort a távolságnégyzetek között, így a valódi teljes mágneses momentum z komponense Z rendszámú atommagra:

$$\mu_z = Ze\frac{\Delta\omega}{3}\langle r^2 \rangle$$

Behelyettesítve a Larmor-frekvenciát:

$$\mu_z = -\frac{Ze^2H}{6mc}\langle r^2 \rangle$$

Amelyből a szuszceptibilitás már leolvasható, a negatív előjel jelenti a diamágneses hatást.

2.3. Pauli szuszceptibilitás

A Pauli szuszceptibilitás a paramágnesség egy másik modellje. $\frac{1}{2}$ spinű Fermi-gáz (Fermi-Dirac-statisztikát követő gáz) paramágnessége. A modell lényege, hogy a Fermi-energia környékén lévő vezetési elektronok járulnak hozzá az elektronspin szuszceptibilitáshoz. A hőmérséklettől független, szemben a kötési elektronok paramágneses szuszceptibilitásával, amely hőmérsékletfüggő (Curie-törvény), és kb. két nagyságrenddel nagyobb, mint a Pauli-szuszeptibilitás. Ez az energiaszeintek betöltöttségi sűrűségéből számolja ki a felfelé és lefelé álló momentumok mennyiségét. A betöltöttségi sűrűságre a Bethe-Sommerfeld sorfejtést alkalmazza. Ezek ismeretében ugyanis a mágneszettség felírható:

$$M = \frac{1}{V}(g\mu_B)(N_{fel} - N_{le})$$

N -be a mágneses indukció is bele van olvasztva. Eredményül a szuszceptibilitás:

$$\chi = (g\mu_B)^2\frac{3}{2}N\frac{\mu_0}{V}\frac{1}{\epsilon_F}$$

Ahol az utolsó tényezőben a Fermi-energia szerepel.

2.4. Landau diamágnesség

A diamágnesség ezen másik modellje már kvantummechanikai megfontolásokon alapul. Az alapötlet szerint a szabad elektornok a mágneses térben körben mozognak, ami megint mágneses teret kelt, és ez gyengíti le a külső teret. Kiindulásként a szabad elektron mágneses térbeli Hamilton-operátora szolgál:

$$H = \frac{p_x^2 + (p_y - eBx)^2 + p_z^2}{2m}$$

Azért kell kvantumosan számolni, mert klasszikusan a mágneses tér kitranszformálható, mi pedig éppen az aszerinti függést keressük. A rendszert jellemző hullámfüggvényt felbontjuk egy y , z és egy x függő rész szorzatára, és vizsgáljuk a Schrödinger-egyenletbeli megoldást, amelyben felismerjük a harmonikus oszcillátor energiáját. Az energiát y és z szerint azonban még ki kell számolni, ezt azonban a betöltöttségi-sűrűségből is ki tudjuk számolni. A mágnesezettséget az energia tér szerinti deriváltjából határozzuk meg, ebből pedig a szuszceptibilitás kapható meg:

$$\chi = -\frac{1}{2} \frac{N}{V} \frac{1}{\epsilon_F} g^2 \mu_B^2 \mu_0$$

amely éppen a Pauli-szuszeptibilitás $-1/3$ -a.

2.5. Ferro, ferri, és antiferromágneses anyagok

Paramágnességről beszélünk, ha a vonzó, térerősítő hatás csak a külső mágneses tér jelenlétekor érezhető (ez a tér rendezi egyirányba a momentumokat, eltávolításával azok újra rendezetlenné válnak, és zérusra átlagolódnak a hatásuk). A diamágnességgel együtt gyengének tekinthetők. A ferro, ferri és antiferromágneses anyagokban a mágnesesség forrásául szolgáló atomi momentumok eleve rendezetten állnak, a különbség csak az irányban és a méretben van. Ha az atomi rendben azonos méretű és egyirányba álló momentumok vesznek részt, akkor az anyag ferromágneses, így ez állandómágneses jellegűt mutat. Ha egymással ellentétesek, és kioltják egymást, akkor antiferromágneses az anyag, ha pedig ellentétes, de különböző nagyságúak a momentumok, akkor ferrimágneses az anyag.

A szilárdtestfizika leírásokat dolgozott ki ezen jelenségek mikroszkópikus magyarázatára.

2.6. Domainek

A ferromágneses anyagoknál a domainek nagy, makroszkópikus méretű azonos beállású területek. Kialakulásuk oka egyszerűen érthető: a momentumoknak kedvező, ha azonos irányba állnak be, azonban amíg a hőmozgás rendezetlenné tudja tenni a rendszert, ez nem érvényesül. Ahogy hűtjük lefelé, egy kritikus pontnál a momentumok beállása erősebb lesz a hőmozgás karakterisztikus energiájánál, és fázisátmenet következik be, a kialakult kis azonos beállású helyek hirtelen makroszkópikus méretűvé tudnak válni, hiszen egymást állítják be a rendezetlen állapotból, ugyanakkor egy másik irányba rendeződött részt nem tudnak megfordítani. Ahol a különböző irányítottágú részek összeérnek ott lesznek a fázishatárok, vagy domain falak az anyagban. Ha a külső teret egyre növeljük, akkor azok a doméneket, amelyekben a momentumok éppen a külső tér irányába állnak növekedni kezdenek, mert a doménhatáron átfordulnak a spinek. Ez a doménfalforogás. Külső erős térrel beállítható az egész anyagban az orientáció egyirányúvá, így maximális térerősség nyerhető.

3. Többi

3.1. Hiszterézis

A hiszterézis a ferromágneses anyagoknak az átmágnesezéssel szemben mutatott ellenállása. Másképpen megfogalmazva, amikor átakarjuk mágnesezni az anyagot, akkor az valamennyire emlékszik korábbi állapotára, ezért adott irányú és mértékű átmágnesezés után kapott remanens (visszamaradó) mágnesség különböző lehet az anyag előzetes mágnesezettségének függvényében. Legszemléletesebben ezt akkor láthatjuk ha teljesen átmágnesezzük az anyagot egyik, majd másik irányba. A bejárt út különbözik a H - M -síkon. Itt külön névvel illetjük a külső tér megszűnésekor hátaahagyott mágnesezettséget (ez a remanens mágnesezettség) és az anyag terét éppen kompenzáló kölső térerősséget (koercitív erő). Ahhoz, hogy az anyagot átmágnesezzük, energiát kell befektetnünk. Az átmágnesezéshez szükséges energia arányos a hiszterézis görbe által bezárt területtel. Vékony területű görbével rendelkező anyagot lágymágnesnek hívunk, míg a vastag területű görbével rendelkezőt permanens mágnesnek.

3.2. Curie-Weiss-törvény

Korábban a mágnesezettség és a külső tér közötti összefüggést ilyen alakúnak gondoltuk: $M = f(H)$, ahol f valamilyen függvény. A hiszterézis során tapasztalt memória effektust Weiss egy belső tér elmélettel próbálta megmagyarázni. Eszerint a spinek egyirányú beállása okozza a visszamaradó mágnesezettségi memóriát, amelyet úgy lehet figyelembe venni, hogy a mágnesezettség a külső téren kívül önmagának is függvénye: $M = f(H + \lambda M)$. Ha H és M is kicsi (nem ferromágneses tartományban), akkor mondhatjuk, hogy f kis argumentumainál még lineárisan változik, így

$$M = \chi \cdot (H + \lambda M)$$

átrendezve

$$M = \frac{\chi}{1 - \chi\lambda} H = \frac{\frac{C}{T}}{1 - \frac{\lambda C}{T}} H = \frac{C}{T - T_C} H$$

Ez a Curie-Weiss törvény, T_C a Curie-hőmérséklet. Ez a formula a Curie-hőmérséklet felett érvényes. Ezen hőmérséklet felett a ferromágnes elveszti rendezett doménjeit, mágnesezettségét és a rendezetlenül beálló részecskék már adnak jelentős mágnesezettséget. Ebben a tartományban az anyag paramágnesként viselkedik, aminek a hőmérsékletfüggése $1/T$ -s.

3.3. Speciális anyagok

3.3.1. Spinüveg

Egyes speciális anyagokat felmágnesezve azok Curie-törvényt követik, azonban ha elveszük a külső mágneses teret egy gyors lebomlás után egy remanens mágnesezettséget mutatnak, amely azonban idővel lassan, de tovább bomlik. Ez a viselkedés egyfajta átmenetként fogható fel a ferro és paramágneses anyagok tulajdonságai között. Magyarázata részben a vegyes ferro és antiferromágneses kötések üvegszerű amorf elhelyezkedésében rejlik.

3.3.2. Mágneses ellenállás (giant magnetoresistance)

Ferromágneses és nemmágneses rétegek szendvicselésével speciális vezető eszköz készíthető, amelynek ellenállása nagyban függ a külső mágneses tértől. Ferromágneses anyagban az ellenállás nagy, ha a spinek rendezetlenül állnak és kicsi, ha a spinek egy irányban állnak. Ezért ha a GMR külső mágneses térben van, akkor igen kicsi az ellenállása, ha azonban nincs jelen tér, akkor igen nagy ellenállást mutat. Az effektus mértéke akár több 100% is lehet. A jelenség oka, a különböző spinű elektornokkal szemben mutatott ellenállás, amely mögött az RKKY magspin és vezetési elektron hiperfinom mágneses csatolása áll.

3.3.3. Szupravezetés

Egyes anyagok igen alacsony hőmérsékletre hűtésekor egy bizonyos anyagra jellemző hőmérséklet alatt az elektromos ellenállás egzaktul nullává válik. A jelenséget elektron-elektron párok (ún. Cooper-párok) létrejöttével sikerült értelmezni, amelyek között a rácsrezgések fononjai tartanak össze. Ilyen párok jönnek létre egy Bose-Einstein kondenzációhoz hasonló jelenség következtében, mivel az így kialakult párok már bozonként tekinthetők.

A 0 ellenállástól független jelenség az, hogy az anyag tökéletes diamágnes lesz. Ez azt jelenti, hogy a szokásos diamágnesek $\chi = -10^{-5} \dots -10^{-7}$ értékétől eltérően a szupravezetőnek $\chi = -1$ (egzaktul), vagyis a relatív permeabilitás $\mu_r = \chi + 1 = 0$, tehát az anyagban levő mágneses indukció nagysága $B = \mu_0 \mu_r H = 0$ a külső H mágneses tértől függetlenül. Szemléletesen az anyag kizárja magából a külső mágneses teret. Ez a jelenség a Meissner-effektus.