Teoria Agregacji i Koagulacji,
Warszawa, 28 marca 1987,
Prace IPPT 41/1987

Kwantowe tunelowanie przy przejściach fazowych I-go rodzaju w antyferromagnetykach

J.Klamut, W.Prystasz

Instytut Niskich Temperatur i Badań Strukturalnych
Polska Akademia Nauk, Wrocław

1. Wstęp

Z teorii przejść fazowych pierwszego rodzaju wiadomo, że w zerze stopni Kelvina prawdopodobieństwo termicznego przejścia z pierwotnego metastabilnego stanu do stanu stabilnego jest równe zero. Oznacza to, że powstawanie nowej stabilnej fazy może zachodzić tylko na drodze tunelowego przejścia pod barierą oddzielającą początkowy stan metastabilny od stanu stabilnego. Mechanizm ten może odgrywać główną rolę w tworzeniu się zarodków nowej stabilnej fazy w środowisku fazy metastabilnej w niskich temperaturach. Prawdopodobieństwo kwantowego tunelowania w cieczach w pobliżu równowagii fazowej oraz w pobliżu granicy stabilności fazowej policzono w [1].

W niniejszej pracy będziemy zajmować się obliczaniem prawdopodobieństwa przejścia pod barierą energetyczną oddzielającą fazę antyferromagnetyczną (AF) od fazy ferromagnetycznej (F) w jednoosiowym antyferromagnetyku w zewnętrznym polu magnetycznym. W tym celu wybieramy hamiltonian w następującej postaci:

$$\mathcal{H} = J S_1 \cdot S_2 - K(S_{12}^2 + S_{22}^2) - H(S_{12} + S_{22}) \qquad (1)$$

gdzie $J>0$ jest całką wymiany, $K>0$ jest stałą anizotropii jednoosiowej, H jest natężeniem zewnętrznego pola magnetycznego.

Jak pokazano w [2] przybliżony stan podstawowy hamiltonianu (1) może być w następujących stanach:

1. AF-faza, dla której $S_{12}=\sigma$, $S_{22}=-\sigma$ ($S_{12} \parallel H$), która jest stabilna dla pól zawartych w granicach

$$0 \le H \le 2\sigma\sqrt{K(J+K)} = H_1.$$

2. SF-faza (spin-flop), w której

$$S_{12}=S_{22}=H\sigma/H_3;$$

$$\sqrt{S_{1x}^2 + S_{1y}^2} = -\sqrt{S_{2x}^2 + S_{2y}^2} = \sigma\sqrt{1-(H/H_3)^2}$$

stabilna w zakresie pól

$$H_3\sqrt{K/(J+K)} = H_2 \le H \le 2\sigma(J-K) = H_3$$

3. F-faza, dla której $S_{1z}=S_{2z}=\sigma$ $(S_{1z} \parallel S_{2z} \parallel H)$, stabilna dla pól $H_s \leq H$.

2. Prawdopodobieństwo kwantowego tunelowania

Będziemy zajmować się przejściem fazowym pierwszego rodzaju pomiędzy stanami AF i F, które jest możliwe gdy $K \geq 1/2J$ [2]. Jak wspomnieliśmy prawdopodobieństwo termicznego przejścia pomiędzy stanami AF i F w niskich temperaturach jest bardzo małe. Dlatego powinniśmy obliczyć prawdopodobieństwo kwantowego tunelowania pod barierą oddzielającą te stany. Aby to uczynić skorzystamy z metody zaproponowanej przez Hemmena i Suto [3].

Podobnie jak w [3] wprowadzimy następującą reprezentację dla operatorów S:

$$S_{ix}=\frac{1}{2}\left\{a\left[\sqrt{S_{iz}(S_{iz}-h)}\right]\exp\left[-h\frac{\partial}{\partial S_{iz}}\right]+a\left[\sqrt{S_{iz}(S_{iz}+h)}\right]\exp\left[h\frac{\partial}{\partial S_{iz}}\right]\right\} \tag{2}$$

$$S_{iy}=\frac{1}{2i}\left\{a\left[\sqrt{S_{iz}(S_{iz}-h)}\right]\exp\left[-h\frac{\partial}{\partial S_{iz}}\right]-a\left[\sqrt{S_{iz}(S_{iz}+h)}\right]\exp\left[h\frac{\partial}{\partial S_{iz}}\right]\right\} \tag{3}$$

gdzie

$$a(S_{iz}) = \sqrt{\sigma(\sigma+h)-S^2_{iz}}$$

Teraz zastosujemy kwasiklasyczne przybliżenie, które polega na trzech krokach. W pierwszym kroku przyjmujemy:

$$\psi = \exp\left[\frac{i}{\hbar}\mathcal{S}\right] \tag{4}$$

gdzie $\mathcal{S}$ jest funkcją tworzącą (działaniem) zależną od S_{12}, S_{22}, czasu t oraz stałej Plancka h. Drugi krok polega na rozwinięciu działania $\mathcal{S}$ w szereg

$$\mathcal{S} = \mathcal{S}_o + \sum_k^{\infty} (h/i)^k\, \mathcal{S}_k \tag{5}$$

i w końcu trzeci krok, który polega na rozwinięciu (2) i (3) w szereg względem h. Podstawiając (4),(5),(3) i (2) do równania Schrodingera:

$$\mathcal{H}\psi = ih\frac{\partial\psi}{\partial t} \tag{6}$$

i zaniedbując wyrazy wyższe niż h otrzymamy klasyczne równanie Hamiltona-Jacobiego:

$$-\frac{\partial\mathcal{S}_o}{\partial t} = V(S_{12},S_{22}) + \frac{1}{2}Ja(S_{12})a(S_{22})\left[\frac{\partial\mathcal{S}_o}{\partial S_{12}} - \frac{\partial\mathcal{S}_o}{\partial S_{22}}\right] \tag{7}$$

gdzie:

$$V(S_{12},S_{22}) = JS_{12}S_{22} - K(S^2_{12}+S^2_{22}) - Ja(S_{12})a(S_{22}) - H(S_{12}+S_{22})$$

Z (6) otrzymamy również standardowy wynik na $\mathscr{S}_1$

$$\mathscr{S}_1 = -\ln\sqrt{p} + c \tag{8}$$

gdzie:

$$p = \frac{\partial \mathscr{S}_0}{\partial S_1} - \frac{\partial \mathscr{S}_0}{\partial S_{22}}$$

Z równań ruchu Hamiltona wiadomo, że $\mathscr{H}$ jest całką ruchu i dlatego robimy znane podstawienie $\mathscr{S}_0 = W(S_{12}, S_{22}) - Et$, z którego mamy energię układu $E = -(\partial\mathscr{S}_0/\partial t)$. W ten sposób z (7) mamy:

$$E = V(S_{12}, S_{22}) + \frac{1}{2} Ja(S_{12})a(S_{22})p^2 \tag{9}$$

gdzie teraz:

$$p = \frac{\partial W}{\partial S_{12}} - \frac{\partial W}{\partial S_{22}}$$

Aby otrzymać prawdopodobieństwo kwantowego tunelowania musimy znaleźć punkty zwrotne ruchu oscylacyjnego w potencjale $V(S_{12}, S_{22})$. Punkty te spełniają równanie:

$$E = V(S_{12}, S_{22}) \tag{10}$$

Teraz wybieramy drogę, po której "cząstka" przechodzi od AF do F, lub z F do AF, przenikając obszar klasycznie niedostępny. Aby uprościć obliczenia wybieramy drogę, na której $S_{22} = \sigma$. Równania (9) i (10) stają się wówczas bardzo proste. Dla $S_{22} = \sigma$

z (10) otrzymujemy punkty zwrotne:

$$S_{12}^{(1,2)} = \frac{J\sigma - H \pm \sqrt{(J\sigma - H)^2 - 4K(E + K\sigma^2 + H\sigma)}}{2K} \qquad (11)$$

Warto zauważyć, że (11) może być otrzymane z równań ruchu, podobnie jak w [3] i [4], przez analogię do równań ruchu dla punktu materialnego.

Z przybliżenia kwasiklasycznego (WKB) wiadomo, że prawdopodobieństwo efektu tunelowego jest następujące:

$$\mathcal{D} = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} W\right] = \exp\left[-\frac{2}{\hbar} \int_{S_{22}^{(1)}}^{S_{12}^{(2)}} \sqrt{2m(S_{12})[E - V(S_{12})]}\, dS_{12}\right] \qquad (12)$$

gdzie:

$$m(S_{12}) = \frac{1}{Ja(S_{12})a(S_{22})}$$

Teraz specyfikujemy energię E dla fazy AF przy przejściu AF $\updownarrow$ F następująco:

$$E = E_{AF} = -J\sigma^2 - 2K\sigma^2 \qquad (13)$$

Z równania (11) otrzymujemy punkty zwrotne:

$$S_{12}^{(1)} = \sigma + \frac{J\sigma - H}{K} = \sigma + \Delta \qquad (14)$$

$$S_{12}^{(2)} = -\sigma \qquad \text{(min. fazy AF)} \tag{15}$$

Z warunku, że $S_{12} \le \sigma$ i (14) otrzymamy, że zewnętrzne pole magnetyczne powinno spełniać następującą nierówność:

$$H \ge J\sigma \tag{16}$$

Dla fazy F energia jest następująca:

$$E = E_F = J\sigma^2 - 2K\sigma^2 - 2H\sigma \tag{17}$$

a punkty zwrotne przy przejściu z F do AF będą:

$$S_{12}^{(1)} = -\sigma + \frac{J\sigma - H}{K} = -\sigma + \Delta \tag{18}$$

$$S_{12}^{(2)} = \sigma \qquad \text{(min. fazy F)} \tag{19}$$

Z warunku $S_{12} \ge -\sigma$ i (18) otrzymamy, że:

$$H \le J\sigma \tag{20}$$

Jeżeli jest spełniony warunek (16) jest możliwe przejście tunelowe z fazy AF do F, ponieważ energia $E_{AF} \ge E_F$. Z drugiej strony warunek $H \le J\sigma$ oznacza, że $E_F \ge E_{AF}$ i jest możliwe przejście tunelowe z fazy F do AF. Łatwo sprawdzić, że maksimum $V(S_{12}, S_{22})$ dla drogi $S_{22} = \sigma$ jest:

$$V(S_{12}) = \frac{(J\sigma^2 - H\sigma)^2 - 4K\sigma^2(K\sigma^2 + H\sigma)}{4K\sigma^2} \tag{21}$$

oraz, że $V_{max} \geq E_{EA}$ i $V_{max} \geq E_F$.

Aby policzyć W dla $E=E_{AF}$ i $E=E_F$ ograniczymy się do pól $H=J\sigma$. Okazuje się, że przy takim przybliżeniu W jest identyczne dla $E=E_{AF}$ i $E=E_F$. Dzięki temu możemy W przedstawić w jednej postaci dla obydwu przejść:

$$W = \frac{\sqrt{2/J}}{\sqrt[4]{\sigma h}} \left\{ \left| \int_{-\sigma}^{\sigma+\Delta} \sqrt{J\sqrt{\sigma h} - \frac{K(\sigma^2 - S_{12}^2)}{\sqrt{\sigma(\sigma+h) - S_{12}^2}}}\, dS_{12} + \right.\right.$$

$$\left.\left. + \frac{1}{2} \int_{-\sigma}^{\sigma+\Delta} \frac{|J\sigma - H|(\sigma + S_{12})}{\sqrt{J\sqrt{\sigma h} - \frac{K(\sigma^2 - S_{12}^2)}{\sqrt{\sigma(\sigma+h) - S_{12}^2}}}}\, dS_{12} \right| \right\} \tag{22}$$

Drugi wyraz w (22) jest mały w porównaniu z pierwszym i może być zaniedbany. Wprowadzając nowe zmienne całkowania do (22) otrzymamy:

$$W = \frac{2}{\sqrt{JK\sigma}}\,\frac{1}{\sqrt[4]{\sigma h}}\,\frac{1}{K\left[K\sigma - J\sqrt{\sigma h}\right]^2}\,\cdot$$

$$\left\{\left|\int_{Z_1}^{Z_2}\frac{(1-Z^2)^2\,dZ}{\sqrt{(1-Z^2)\left[1-\frac{K\sigma - J\sqrt{\sigma h}}{2K\sigma}Z^2\right]}}\right.\right. +$$

$$\left.\left. + \int_{Z_1}^{Z_2}\frac{J\sqrt{\sigma h}\left[K\sigma - J\sqrt{\sigma h}\right](1-Z^2)\,dZ}{\sqrt{(1-Z^2)\left[1-\frac{K\sigma - J\sqrt{\sigma h}}{2K\sigma}Z^2\right]}}\right|\right\} \qquad (23)$$

gdzie

$$Z_{12} = \sqrt{\frac{K\sigma - K\sqrt{\sigma^2-(S_{12}^{(1,2)})^2}}{K\sigma - J\sqrt{\sigma h}}}$$

W ten sposób prawdopodobieństwo może być wyrażone przez całki eliptyczne. Należy podkreślić, że wyraz zaniedbany w (22) może również być wyrażony przez całki eliptyczne.

Z [2] wiadomo, że dla $K \geq J$ faza SF znika i droga tunelowania wybrana przez nas może być konkurencyjna w stosunku do innych możliwych, zwłaszcza gdy K>>J. Zauważmy na koniec, że podobny problem był rozważany w [3] dla jednoosiowego ferromagnetyka w poprzecznym polu magnetycznym, ale tam przejście tunelowe zachodziło pomiędzy dwoma identycznymi stanami.

Literatura

1. I.M.Lifschitz, Yu.Kagan, Zh.E.T.F., 62,385,1972
2. W.Prystasz, G.Kozłowski, Acta Physica Polonica, A57,205,1980
3. J.L.van Hemmen, A.Suto, Stochastische Matematische Modelle, Preprint no.342 Universitate Heidelberg, November 1985
4. J.Klamut, A.Z.Patashinski, J.Sznajd, Physica 96A,640,1979