Toplotna kapaciteta feromagnetnih magnonov

Peter Jakopič

21.4.2008

1 Naloga:

Uporabi približno zvezo za disperzijo magnonov $\omega = Ak^2$ in izračunaj prvi člen v toploti kapaciteti tridimenzionalnega feromagneta pri nizkih temperaturah $k_B T << J$.[1]

2 Disperzijska zveza za feromagnetne fonone.

V Heisenbergovemu modelu hamilton magnetne interakcije zapišemo kot:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \vec{S}_i \vec{S}_j \tag{1}$$

kjer je $J = J(\mathbf{R})$ in $\mathbf{R}$ razdalja med najbližjima sosedoma.

Osnovno stanje ψ_0 spinov v feromagnetu si lahko predstavljamo kot na sliki 1.

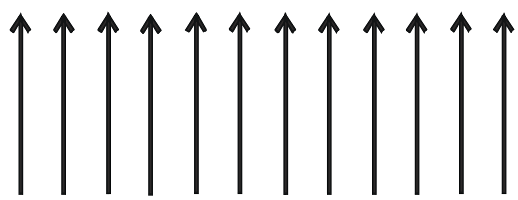

Figure 1: Osnovno stanje spinov $|\psi_0\rangle$ v 1D modelu.

Če z $\hat{S}_i^-$ označimo operator, ki obrne spin na i-tem elektronu lahko zapišemo vzbujeno valovno funkcijo kot (slika 2):

$$|\varphi_i\rangle = \hat{S}_i^- |\psi_0\rangle \tag{2}$$

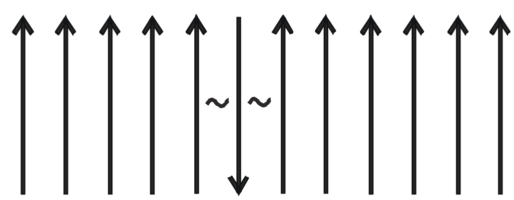

Figure 2: Primer vzbujenega stanja spinskega sistema. Prikazana je funkcija $|\varphi_i\rangle$. (V konkretnem primeru $i = 6$).

Tako vzbujeno stanje pa ni lastno stanje hamiltoniana v En.(1), kar pokažemo tako, da hamiltonjan razpišemo:

$$H = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \mathbf{S}_j = -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) \right] \tag{3}$$

[1] C.Kittel, Introduction to Solid State Physics, eight edition, (John Wiley & Sons, 2005) str 357, 2. naloga

kjer je $S_i^{\pm} = S_i^x \pm i S_i^y$, in delujemo na stanje En.(2):

$$\begin{aligned} H|\varphi_i\rangle &= \left\{ -J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} \left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right) \right] \right\} |\varphi_i\rangle \\ &= \left(E_0 + \frac{Jz}{2} \right) |\varphi_i\rangle - \frac{J}{2} \sum_{j=n.s.} |\varphi_j\rangle \end{aligned} \tag{4}$$

kjer je z število najblžjih sosedov. Prva dva člena prideta iz operatorjev $S_i^z S_j^z$, ki dajo osnovno stanje, popravljeno za vsoto produktov obrnjenega spina z njegovimi najbližjimi sosedi, zadnji člen pa pride iz operatorjev $\frac{1}{2}\left(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+ \right)$, ki obrnejo stanja na vseh najbližjih sosedih. Stanje iz slike 2 torej ni lastno stanje Heissenbergovega hamiltonjana.

Heissenbergov hamiltonijan očitno sklaplja funkcije $|\varphi_i\rangle$, ki imajo v mreži obrnjen le en spin, zato bo dober kandidat za lastno funkcijo neka linearna kombinacija teh funkcij. Zapišemo nastavek v obliki spinskih valov oz. magnonov:

$$|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_i e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_i} |\varphi_i\rangle \tag{5}$$

kjer je $\mathbf{R}_i$ vektor do posameznega spina in N število spinov v mreži. (Funkcija je normalizirana tako, da je skupni spin ravno 1). Ko na enačbo En.(5) delujemo z Heisenbergovim hamiltonjanom dobimo:

$$H|\phi_{\mathbf{k}}\rangle = (E_0 + \varepsilon_{\mathbf{k}}) |\phi_{\mathbf{k}}\rangle \tag{6}$$

kjer je

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = \frac{Jz}{2} - \frac{J}{2} \sum_{j=n.s.} e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} = \frac{J}{2} \sum_{j=n.s.} \left(1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right) \tag{7}$$

Ker je $J(-\mathbf{R}) = J(\mathbf{R})$ in najbližji sosedi vedno nastopajo v parih lahko zapišemo:

$$\begin{aligned} \left(1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right) + \left(1 - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} \right) &= 2 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} - e^{-i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} = \\ &= 2 - 2\cos \mathbf{k}\mathbf{R} = \\ &= 4 \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{R}_j}{2} \end{aligned} \tag{8}$$

Dobimo:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = J \sum_{j=n.s.} \sin^2 \frac{\mathbf{k}\mathbf{R}_j}{2} \tag{9}$$

3 Toplotna kapaciteta magnonov

Magnoni se v mreži spinov za dovolj majhne gostote obnašajo kot bozoni (npr. fotoni, fononi), zato uporabimo znani formalizem. Skupno energijo magnonov zapišemo kot:

$$E = \sum_k n_k \varepsilon_k \tag{10}$$

kjer je n_k število vzbujenih stanj in je podano z Bose-Einsteinovo porazdelitvijo:

$$n_k = \frac{1}{\exp\left(\varepsilon_k / k_B T\right) - 1} \tag{11}$$

Skupno energijo lahko zapišemo v obliki integrala:

$$E = \int_0^\infty \frac{\varepsilon}{\exp\left(\varepsilon_k / k_B T\right) - 1} g(\varepsilon)\, d\varepsilon \tag{12}$$

kjer je $g(\varepsilon)$ gostota stanj. Za nizke temperature bo vrednost pod integralom različna od nič samo v primeru, ko bo red velikosti ε_k manjši ali enak redu velikosti $k_B T$. Ker nas zanima primer, ko je $k_B T << J$, lahko lahko izraz En.(9) razvijemo:

$$\varepsilon_{\mathbf{k}} = J \sum_{j=n.s.} \left(\frac{\mathbf{k}\mathbf{R}_j}{2} \right)^2 \tag{13}$$

Ker nimamo točno podane oblike mreže zapišemo $\varepsilon_k = \alpha k^2$, $(\alpha = \hbar A)$ kjer smo upoštevali simetrijo mreže. Gostoto stanj v En.(12) dobimo kot:

$$\begin{aligned} g(\varepsilon) &= \frac{1}{V} \frac{dN_k}{d\varepsilon} = \\ &= \frac{1}{V} \frac{1}{2\alpha k} 4\pi k^2 \frac{V}{(2\pi)^3} = \\ &= \frac{\sqrt{\varepsilon}}{4\pi^2 \alpha^{3/2}} \end{aligned} \tag{14}$$

Za energijo na enoto volumna dobimo torej:

$$\begin{aligned} \frac{E}{V} &= \int_0^\infty \frac{1}{\exp(\varepsilon_k / k_B T) - 1} \varepsilon \frac{\sqrt{\varepsilon}}{4\pi^2 \alpha^{3/2}} d\varepsilon = \\ &= \frac{(k_B T)^{5/2}}{4\pi^2 \alpha^{3/2}} \int_0^\infty \frac{x^{3/2}}{e^x - 1} dx = \\ &= \frac{3 (k_B T)^{5/2}}{16 \pi^{3/2} \alpha^{3/2}} \zeta \left(\frac{5}{2} \right) \end{aligned} \tag{15}$$

Toplotno kapaciteto na enoto volumna izrazimo kot

$$\begin{aligned} C_v &= \frac{\partial E}{\partial T} = \\ &= \frac{15}{32 \pi^{3/2}} \zeta \left(\frac{5}{2} \right) k_B \left(\frac{k_B T}{\alpha} \right)^{\frac{3}{2}} = \\ &= 0.113 * k_B \left(\frac{k_B T}{\alpha} \right)^{3/2} \end{aligned} \tag{16}$$