Magnetizacija feromagneta pri nizkih temperaturah

Jakob Battelino Prelog
28. 5. 2010

Naloga

Določi število magnonov v feromagnetu pri temperaturah, ki so veliko nižje od temperature prehoda. Privzemi enostaven 3D kubičen sistem ($3DSC$ sistem), ki ga opiše Heisenbergova Hamiltonka delcev s spinom $S = \frac{1}{2}$ in približek najbližjih sosedov s skopitvijo J. Iz rezultatov izračunaj temperaturno odvisnost magnetizacije M.

Mihaly L. in Martin M.C., *Solid State Physics: Problems and Solutions* (John Wiley & Sons, inc., New York, 1996), Problem 6.13

Rešitev

Število magnonov

Število magnonov $\mathcal{N}_m$ bomo izračunali z enačbo

$$\mathcal{N}_m = V \int g(\mathcal{E}) f(\mathcal{E}) d\mathcal{E}. \tag{1}$$

Tu je z V označen gledani volumen, z $\mathcal{E}$ energija, z $g(\mathcal{E})$ gostota stanj magnonov in z $f(\mathcal{E})$ statistična funkcija. Za magnone velja Bose-Einsteinova statistika, zato lahko $f(\mathcal{E})$ kar takoj zapišemo

$$f(\mathcal{E}) = \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}_{\mathbf{k}}}{k_B T}} - 1}. \tag{2}$$

Za izračun gostote stanj magnonov, pa se moramo bolj potruditi.

Gostoto stanj delcev $g(\mathcal{E})$ lahko zapišemo kot

$$g(\mathcal{E}) = \frac{1}{V}\frac{d\mathcal{N}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}}. \tag{3}$$

$d\mathcal{N}$ izračunamo v faznem prostoru kot $d\mathcal{N} = dV_k/V_{k0}$, kjer je dV_k volumen faznega prostora pri velikosti valovnega števila k in V_{k0} volumen, ki ga zaseda eno stanje v $\mathbf{k}$ prostoru. Zapišemo $dV_k = 4\pi k^2 dk$ in $V_{k0} = (\frac{2\pi}{L})^3$, ter prepišemo (3) v

$$\begin{aligned}
g(\mathcal{E}) &= \frac{1}{V}\frac{d\mathcal{N}(\mathcal{E})}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{V}\frac{1}{V_{k0}}\frac{dV_k}{d\mathcal{E}} \\
g(\mathcal{E}) &= \frac{1}{V}\Big(\frac{L}{2\pi}\Big)^3\frac{4\pi k^2 dk}{d\mathcal{E}} = \frac{k^2}{2\pi^2}\frac{dk}{d\mathcal{E}}.
\end{aligned} \tag{4}$$

Tu smo upoštevali tudi, da je $V = L^3$.

Za izračun števila magnonov moramo torej poiskati še odvod $\frac{dk}{d\mathcal{E}}$. Le tega dobimo iz disperzijske zveze $\mathcal{E}(\mathbf{k})$. Disperzije se lotimo kvantnomehansko in s Heisenbergovim modelom, v katerem je Hamiltonov operator magnetne interakcije

$$\mathbf{H} = -J\sum_{i,j}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j. \tag{5}$$

Z J je označen sklopitveni faktor in z $\mathbf{S}$ spinski operator. Za J velja tudi $J > 0$ in $J = J(a)$, kjer je a razdalja med najbližjima sosedma, torej dolžina stranice osnovne celice $3DSC$ mreže.

Osnovno stanje $|0\rangle$ feromagneta si lahko predstavljamo kot situacijo, kjer so vsi spini obrnjeni v isto smer. Če izberemo smer spinov z, ter uvedemo operatorja obračanja spinov $\mathbf{S}_i^- = S_i^x + iS_i^y$ in $\mathbf{S}_i^+ = S_i^x - iS_i^y$, lahko Heisenbergovo Hamiltonko razpišemo

$$\mathbf{H} = -J\sum_{i,j}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j = \mathbf{H} = -J\sum_{i,j}\Big(S_i^z S_j^z + \tfrac{1}{2}\big(S_i^+ S_j^- + S_i^- S_j^+\big)\Big). \tag{6}$$

Indeks i pri operatorjih obračanja spinov pomeni, da operator obrne spin delca na mestu i.

Zamislimo si sedaj takšno vzbujeno stanje, kjer je spin na mestu i obrnjen. Stanje označimo z $|i\rangle$. Na to stanje sedaj delujmo s Hamiltonko

$$
\begin{aligned}
\mathbf{H}\,|i\rangle &= \Big[-J\sum_{i,j}\mathbf{S}_i\mathbf{S}_j = \mathbf{H} = -J\sum_{i,j}\Big(S_i^zS_j^z + \tfrac{1}{2}\big(S_i^+S_j^- + S_i^-S_j^+\big)\Big)\Big]\,|i\rangle \\
\mathbf{H}\,|i\rangle &= \Big(E_0 + \frac{Jz}{2}\Big)\,|i\rangle + \frac{J}{2}\sum_{j=n.s.}|j\rangle\,. \qquad (7)
\end{aligned}
$$

Vidimo, da stanje $|i\rangle$ ni lastno stanje Hamiltonovega operatorja, iz zadnje vsote po najbližjih sosedih pa vidimo tudi, da Hamiltonov operator sklaplja takšna stanja. Kot nastavek za lastno stanje zato vzamemo linearno kombinacijo takšnih stanj, kjer je obrnjen le en spin. Nastavek zapišemo v obliki spinskih valov, ali *magnonov*

$$
|\mathbf{k}\rangle = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_j e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}\,|j\rangle \qquad (8)
$$

kjer je N število spinov v mreži in $\mathbf{R}_i$ vektor do spina na mestu i. S Hamiltonovim operatorjem sedaj delujmo na nastavek:

$$
\begin{aligned}
\mathbf{H}\,|\mathbf{k}\rangle &= (E_0 + \mathcal{E}_\mathbf{k})\,|\mathbf{k}\rangle\,, \qquad (9) \\
\mathcal{E}_\mathbf{k} &= \frac{Jz}{2} - \frac{J}{2}\sum_{j=n.s.}e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j} = \frac{J}{2}\sum_{j=n.s.}\big(1 - e^{i\mathbf{k}\mathbf{R}_j}\big). \qquad (10)
\end{aligned}
$$

Z E_0 je označena energija osnovnega stanja $E_0 = -NJS^2$, z $\mathcal{E}_\mathbf{k}$ pa energija magnona v stanju $|\mathbf{k}\rangle$. Upoštevamo še, da za $\mathbf{R}$ po najbližjih sosedih v $3DSC$ mreži velja $\|\mathbf{R}\| = a$ in da v izbranem koordinatnem sistemu velja $\mathbf{R} \in \{(a,0,0),(0,a,0)\cdots\}$. Disperzijsko zvezo lahko tako nekoliko predelamo

$$
\begin{aligned}
\mathcal{E}_\mathbf{k} &= \frac{J}{2}6 - \frac{J}{2}\Big(\overbrace{\big(e^{ik_xa} + e^{-ik_xa}\big)}^{2\cos(k_xa)} + 2\cos(k_ya) + 2\cos(k_za)\Big) \\
\mathcal{E}_\mathbf{k} &= 2JS(3 - \cos(k_xa) - \cos(k_ya) - \cos(k_za)). \qquad (11)
\end{aligned}
$$

V zadnjem koraku smo upoštevali tudi, da je spin $S = \frac{1}{2}$. Pri nizkih temperaturah in torej nizkih energijah lahko $\cos(k_qq)$ razvijemo v $1 - \frac{k_q^2q}{2}$, s čemer se disperzijska zveza poenostavi v

$$
\mathcal{E}_\mathbf{k} = JSk^2a^2. \qquad (12)
$$

Manjkajoči odvod sedaj enostavno izračunamo

$$\frac{dk}{d\mathcal{E}} = \frac{1}{2JSa^2k}. \tag{13}$$

Enačbi (12) in (13) vstavimo v enačbo (4) in končno izračunamo gostoto stanj magnonov

$$g(\mathcal{E}) = \frac{k^2}{2\pi^2}\frac{dk}{d\mathcal{E}} = \frac{\sqrt{\mathcal{E}}}{4(JSa^2)^{3/2}\pi^2}. \tag{14}$$

Za število magnonov pa rešimo še integral (1)

$$\begin{aligned}
\mathcal{N}_m &= V\int \frac{1}{e^{\frac{\mathcal{E}}{k_BT}}-1}\frac{\sqrt{\mathcal{E}}}{4(JSa^2)^{3/2}\pi^2}d\mathcal{E} \\
\mathcal{N}_m &= \frac{V}{4\pi^2}\Big(\frac{k_BT}{JSa^2}\Big)^{3/2}\int_0^\infty \frac{x^{\frac{1}{2}}}{e^x-1}dx \\
\mathcal{N}_m &= \frac{V}{4\pi^2}\Big(\frac{k_BT}{JSa^2}\Big)^{3/2}\Gamma(\tfrac{3}{2})\zeta(\tfrac{3}{2})
\end{aligned} \tag{15}$$

pri katerem smo si pomagali s substitucijo $x = \frac{\mathcal{E}}{k_BT}$ in integralskimi tabelami.

Magnetizacija

Opremljeni s tem rezultatom, lahko izračunamo magnetizacijo v odvisnosti od temperature $M(T)$ iz enacbe

$$M(T) = NS - \mathcal{N}_m \tag{16}$$

v kateri je z N število vseh spinov v sistemu. Produkt NS predstavlja magnetizacijo osnovnega stanja, temperaturni popravek k njej pa je število obrnjenih obrnjenih spinov, ki je v uporabljenem približku enako številu magnonov. Če nas zanima zgolj splošna sorazmernostna zakonitost med magnetizacijo in temperaturo, jo lahko kar takoj preberemo iz enačbe (15)

$$\Delta M(T) \propto T^{3/2}. \tag{17}$$