Magnony v Heisenbergově modelu

Ilja Turek

May 28, 2018

1 Klasické spinové vlny ve feromagnetech

• uvažujeme klasické lokalizované spiny na Bravaisově mřížce (indexy uzlů mřížky m, n), které interagují podle izotropního Heisenbergova hamiltoniánu H s feromagnetickými párovými výměnnými interakcemi J_{mn} ($J_{nm} = J_{mn} \geq 0$, $J_{mm} = 0$):

$$H \;=\; -\,\frac{1}{2} \sum_{mn} J_{mn}\, \mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_n \;-\; b \sum_{m} s_{mz}\,, \tag{1}$$

kde $b > 0$ značí malé kladné magnetické pole ve směru osy z ($b \to 0$) a kde jednotkové vektory $\mathbf{s}_m = (s_{mx}, s_{my}, s_{mz})$ leží v okolí 'severního pólu' ($|s_{mx}| \ll 1$, $|s_{my}| \ll 1$, $s_{mz} \approx 1$)

• naše cíle jsou: (i) existence a dynamika kolektivních excitací [spinových vln (magnonů) a jejich disperzní zákon] a (ii) statistické vlastnosti (zejména nízkoteplotní chování $\langle s_{mz} \rangle$)

• v případě jediného spinu (uzlový index vynechán) je hamiltonián

$$H = -b s_z\,, \tag{2}$$

jehož statistické vlastnosti zahrnují známou teplotní závislost $\langle s_z \rangle$:

$$\langle s_z \rangle = \mathcal{L}(\beta b)\,, \qquad \beta = (k_{\mathrm{B}} T)^{-1}\,, \qquad \mathcal{L}(x) = \coth(x) - x^{-1}\,, \tag{3}$$

kde $\mathcal{L}(x)$ značí Langevinovu funkci s asymptotikami $\mathcal{L}(x) \approx x/3$ pro $x \to 0$ a $\mathcal{L}(x) \approx 1 - x^{-1}$ pro $x \to +\infty$

• dynamika jediného spinu plyne ze základních Poissonových závorek

$$\{s_x, s_y\} = \kappa s_z\,, \qquad \{s_y, s_z\} = \kappa s_x\,, \qquad \{s_z, s_x\} = \kappa s_y\,, \tag{4}$$

kde $\kappa > 0$ je konstanta, a z hamiltonovských pohybových rovnic

$$\dot{s}_x = \{s_x, H\} = \kappa b s_y \,, \qquad \dot{s}_y = \{s_y, H\} = -\kappa b s_x \,. \tag{5}$$

Ty lze snadno řešit např. zavedením komplexních proměnných

$$s_\pm = \frac{s_x \pm i s_y}{\sqrt{2}} \qquad \Rightarrow \qquad \{s_-, s_+\} = i\kappa s_z \,, \tag{6}$$

což dává

$$\dot{s}_\pm = \mp i\kappa b \, s_\pm \,, \qquad s_\pm(t) = s_\pm(0)\exp(\mp i\omega t) \,, \qquad \omega = \kappa b \,, \tag{7}$$

což odpovídá periodickému pohybu s frekvencí ω úměrnou magnetickému poli b.

Poznamenejme, že v tomto hamiltonovském popisu představuje jednotková koule ($s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = 1$) dvoudimenzionální fázový prostor jediného spinu.

• pro spiny na Bravaisově mřížce vyjádříme všechny z-ové složky jednotkových spinových vektorů $\mathbf{s}_m$ pomocí složek x- a y-ových,

$$s_{mz} \;=\; \sqrt{1 - s_{mx}^2 - s_{my}^2} \;\approx\; 1 - \frac{s_{mx}^2 + s_{my}^2}{2} \,, \tag{8}$$

což vede k následující aproximaci původního hamiltoniánu, rov. (1):

$$H \;=\; \frac{1}{2}(\mathcal{J} + b)\sum_m (s_{mx}^2 + s_{my}^2) \;-\; \frac{1}{2}\sum_{mn} J_{mn}\,(s_{mx}s_{nx} + s_{my}s_{ny}) \,, \tag{9}$$

kde jsme ignorovali aditivní konstantu a zanedbali členy 4. řádu v s_{mx}, s_{ny}. Veličina $\mathcal{J}$ značí mřížkovou sumu

$$\mathcal{J} = \sum_n J_{mn} > 0 \,. \tag{10}$$

• v analogii s rov. (6) zavedeme komplexní spinové proměnné

$$s_{m\pm} \;=\; \frac{s_{mx} \pm i s_{my}}{\sqrt{2}} \,, \tag{11}$$

což vede ke vztahům

$$s_{mx} \;=\; \frac{s_{m+} + s_{m-}}{\sqrt{2}} \,, \qquad s_{my} \;=\; -i\,\frac{s_{m+} - s_{m-}}{\sqrt{2}} \,, \tag{12}$$

a k identitám

$$\begin{aligned} s_{mx}^2 + s_{my}^2 \;&=\; 2 s_{m+} s_{m-} \,, \\ s_{mx}s_{nx} + s_{my}s_{ny} \;&=\; s_{m+}s_{n-} + s_{m-}s_{n+} \,. \end{aligned} \tag{13}$$

Dále platí zřejmý vztah

$$s_{m+} = s_{m-}^{*} \,. \tag{14}$$

• přibližný hamiltonián, rov. (9), může být nyní převeden do tvaru

$$H \;=\; (\mathcal{J} + b) \sum_{m} s_{m+} s_{m-} \;-\; \sum_{mn} J_{mn}\, s_{m+} s_{n-} \,. \tag{15}$$

Dynamika generovaná tímto hamiltoniánem plyne z přibližných Poissonových závorek (pro jednoduchost s $\kappa = 1$):

$$\{s_{mx}, s_{ny}\} = \delta_{mn} s_{mz} \approx \delta_{mn} \,, \qquad \{s_{m-}, s_{n+}\} \approx i\delta_{mn} \,, \tag{16}$$

což dává konečné pohybové rovnice

$$\dot{s}_{j-} \;=\; \{s_{j-}, H\} \;=\; i(\mathcal{J} + b) s_{j-} \;-\; i \sum_{n} J_{jn} s_{n-} \,, \tag{17}$$

které představují soustavu lineárních diferenciálních rovnic 1. řádu pro lokální spinové proměnné s_{j-}.

• pro systémy s translační invariancí párových interakcí, $J_{m+r,n+r} = J_{mn}$, lze soustavu pohybových rovnic, rov. (17), vyřešit pomocí mřížkových Fourierových transformací:

$$\begin{aligned} \tilde{J}(\mathbf{k}) &= \sum_{n} \exp(i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_n)\, J_{n0} \,, \\ \tilde{s}_{\pm}(\mathbf{k}) &= \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{n} \exp(\mp i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_n)\, s_{n\pm} \,, \end{aligned} \tag{18}$$

kde $\mathbf{k}$ je vektor reciprokého prostoru (typicky v 1. Brillouinově zóně dané Bravaisovy mřížky), $\mathbf{T}_n$ značí vektor n-tého mřížkového uzlu a kde N značí počet mřížkových uzlů ve velkém konečném krystalu s periodickými okrajovými podmínkami

• zřejmým důsledkem předchozí definice, rov. (18), je

$$\tilde{s}_{+}(\mathbf{k}) = \tilde{s}_{-}^{*}(\mathbf{k}) \,, \tag{19}$$

a inverzní mřížková Fourierova transformace daná pomocí:

$$s_{n\pm} \;=\; \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \exp(\pm i\mathbf{k} \cdot \mathbf{T}_n)\, \tilde{s}_{\pm}(\mathbf{k}) \,, \tag{20}$$

kde suma probíhá přes N diskrétních vektorů $\mathbf{k}$ v 1. Brillouinově zóně

• pro Poissonovy závorky dostáváme z rov. (18) a rov. (16)

$$\begin{aligned}\{\tilde{s}_-(\mathbf{k}), \tilde{s}_+(\mathbf{k}')\} &= \frac{1}{N}\sum_{mn} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}_m - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{T}_n)\, \underbrace{\{s_{m-}, s_{n+}\}}_{i\delta_{mn}} \\ &= \underbrace{\frac{1}{N}\sum_{n} \exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{T}_n]}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}\; i\,,\end{aligned}$$

což nakonec dává jednoduché pravidlo

$$\{\tilde{s}_-(\mathbf{k}), \tilde{s}_+(\mathbf{k}')\} \,=\, i\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\,, \tag{21}$$

kde $\mathbf{k}$ a $\mathbf{k}'$ patří k N diskrétním vektorům v 1. Brillouinově zóně

• Fourierova transformace rov. (17) dává výsledek

$$\dot{\tilde{s}}_-(\mathbf{k}) \,=\, i\omega(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\,, \qquad \omega(\mathbf{k}) \,=\, b + \mathcal{J} - \tilde{J}(\mathbf{k})\,, \tag{22}$$

který dokazuje, že časový vývoj proměnné $\tilde{s}_-(\mathbf{k})$ pro vybraný vektor $\mathbf{k}$ je nezávislý na dynamice pro ostatní vektory $\mathbf{k}' \neq \mathbf{k}$; veličina $\omega(\mathbf{k})$ značí frekvenci příslušného kolektivního módu – spinové vlny (magnonu)

• závislost frekvence $\omega(\mathbf{k})$ na vektoru $\mathbf{k}$ definuje magnonový disperzní zákon, viz příklad na obr. 1; platí: (i) $\omega(\mathbf{k}) \geq 0$, (ii) $\omega(-\mathbf{k}) = \omega(\mathbf{k})$, a (iii) $\omega(\mathbf{k}) \approx Dk^2$ pro nulové pole ($b = 0$) a $k \to 0$ v kubických mřížkách, kde D značí konstantu tuhosti spinových vln. Vlastnost $\omega(\mathbf{0}) = 0$ pro $b = 0$ odráží invarianci izotropního spinového hamiltoniánu, rov. (1), vůči globální rotaci všech lokálních spinů $\mathbf{s}_m$.

• řešení rov. (22) je triviální; řešení původních pohybových rovnic, rov. (17), plyne z inverzní Fourierovy transformace, rov. (20), tj. je dáno lineární superpozicí příspěvků jednotlivých módů

• transformace hamiltoniánu, rov. (15), do výrazu obsahujícího proměnné $\tilde{s}_\pm(\mathbf{k})$ plyne z využití inverzní Fourierovy transformace, rov. (20). To dává pro první člen rov. (15):

$$\begin{aligned}\sum_m s_{m+}s_{m-} &= \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \underbrace{\frac{1}{N}\sum_m \exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{T}_m]}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}}\, \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k}') \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\,,\end{aligned}$$

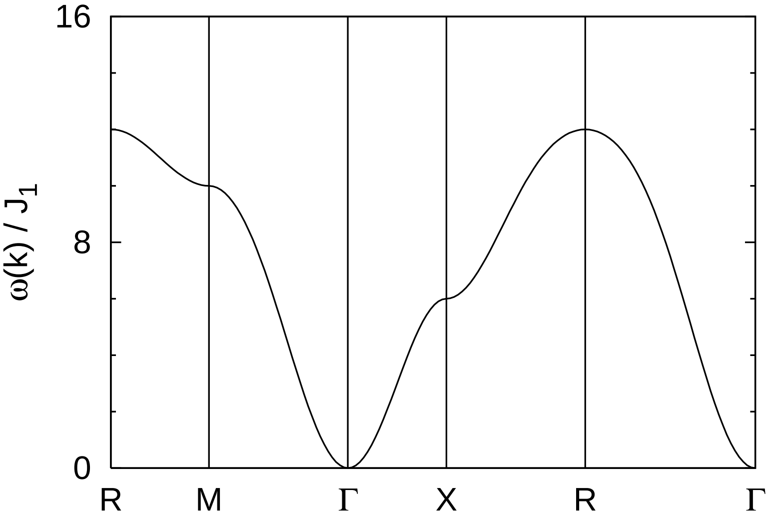

Figure 1: Magnonový disperzní zákon, rov. (22), pro feromagnet na prosté kubické mřížce s výměnnými interakcemi J_{mn} nenulovými jen mezi prvními ($J_1 > 0$) a druhými ($J_2 = J_1/8$) nejbližšími sousedy. Magnonová frekvence $\omega(\mathbf{k})$ pro $b = 0$ je vynesena podél hran ireducibilní Brillouinovy zóny prosté kubické mřížky.

zatímco pro druhý člen v rov. (15) dostáváme:

$$
\begin{aligned}
&\sum_{mn} J_{mn}\, s_{m+} s_{n-} \\
&\quad = \frac{1}{N} \sum_{mn} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} J_{mn} \exp(i\mathbf{k}\cdot\mathbf{T}_m - i\mathbf{k}'\cdot\mathbf{T}_n)\, \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k}') \\
&\quad = \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k}') \underbrace{\frac{1}{N}\sum_n \exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{T}_n]}_{\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}} \underbrace{\sum_m \exp[i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{T}_m - \mathbf{T}_n)]\, J_{mn}}_{\tilde{J}(\mathbf{k})} \\
&\quad = \sum_{\mathbf{k}} \tilde{J}(\mathbf{k})\tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\,.
\end{aligned}
$$

• konečný tvar hamiltoniánu pak je

$$
H = \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k})\tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\,, \tag{23}
$$

což dokazuje [s pomocí rov. (19) a rov. (21)], že systém je ekvivalentní soustavě N nezávislých lineárních harmonických oscilátorů s frekvencemi $\omega(\mathbf{k})$

• statistické vlastnosti transformovaného hamiltoniánu, rov. (23), vedou k relacím

$$
\langle \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k}')\rangle = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\rangle\,, \qquad \langle \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\rangle = \frac{k_{\mathrm{B}}T}{\omega(\mathbf{k})}\,, \tag{24}
$$

kde první odráží nezávislost dvou módů s $\mathbf{k} \neq \mathbf{k}'$, zatímco druhá je důsledkem ekvipartičního teorému klasické Boltzmannovy statistiky (aplikované na lineární harmonický oscilátor)

• z-ovou složku m-tého lokálního spinu lze vyjádřit z rov. (8), rov. (13) a rov. (20) jako

$$s_{mz} = 1 - s_{m+}s_{m-} = 1 - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp[i(\mathbf{k}-\mathbf{k}')\cdot\mathbf{T}_m]\,\tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k}')\,,$$

takže její statistické vystředování lze snadno získat z rov. (24),

$$\langle s_{mz}\rangle = 1 - \frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{s}_+(\mathbf{k})\tilde{s}_-(\mathbf{k})\rangle = 1 - k_{\mathrm{B}}T\,\frac{1}{N}\sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\omega(\mathbf{k})}\,. \tag{25}$$

Tento výsledek dokazuje, že: (i) redukce střední magnetizace při konečných teplotách je díky teplotní excitaci spinových vln, a (ii) klasický přístup vede k lineárnímu poklesu magnetizace s rostoucí teplotou, v rozporu s Blochovým 3/2-ovým zákonem.

2 Kvantový případ pro spiny $S = 1/2$

• v případě jediného kvantového spinu se spinovým kvantovým číslem S ($S = 1/2, 1, 3/2, 2, \ldots$) je Hilbertův prostor $(2S+1)$-dimenzionální a spinové operátory $\mathbf{s} = (s_x, s_y, s_z)$ splňují $\mathbf{s}^2 = s_x^2 + s_y^2 + s_z^2 = S(S+1)$ a komutační relace (s $\hbar = 1$)

$$[s_x, s_y] = is_z\,, \qquad [s_y, s_z] = is_x\,, \qquad [s_z, s_x] = is_y\,, \tag{26}$$

které odpovídají klasickým Poissonovým závorkám, rov. (4)

• v případě $S = 1/2$ lze spinové operátory realizovat pomocí Pauliho spinových matic 2×2 jako

$$s_x = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \quad s_y = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 0 & -i \\ i & 0 \end{pmatrix}, \quad s_z = \frac{1}{2}\begin{pmatrix} 1 & 0 \\ 0 & -1 \end{pmatrix} \tag{27}$$

• Hamiltonián spinu interagujícího s magnetickým polem b ve směru osy z je stejný jako v klasickém případě, rov. (2),

$$H = -bs_z\,, \tag{28}$$

a jeho statistické vlastnosti pro $S = 1/2$ lze snadno odvodit z vlastních hodnot operátoru s_z, tj. $\lambda_\uparrow = 1/2$ a $\lambda_\downarrow = -1/2$, a z příslušných vlastních vektorů

$$|\uparrow\rangle = \begin{pmatrix} 1 \\ 0 \end{pmatrix}, \qquad |\downarrow\rangle = \begin{pmatrix} 0 \\ 1 \end{pmatrix}, \tag{29}$$

což dává kvantovou statistickou střední hodnotu s_z rovnou

$$\langle s_z \rangle = \frac{1}{2} \tanh\left(\frac{\beta b}{2}\right), \tag{30}$$

kde $\tanh(x) \approx x$ pro $x \to 0$ a $\tanh(x) \approx 1 - 2\exp(-2x)$ pro $x \to +\infty$. Poslední výsledek lze zobecnit pro vyšší S; to vede na

$$\langle s_z \rangle = S\mathcal{B}_S(\beta S b), \tag{31}$$

kde $\mathcal{B}_S(x)$ značí Brillouinovu funkci.

- dynamika spinových operátorů v Heisenbergově reprezentaci

$$A(t) = \exp(iHt)A\exp(-iHt), \qquad \dot{A}(t) = i[H, A(t)], \tag{32}$$

dává pohybové rovnice stejné jako v klasickém případě, rov. (5),

$$\dot{s}_x = -ib[s_z, s_x] = bs_y, \qquad \dot{s}_y = -ib[s_z, s_y] = -bs_x, \tag{33}$$

které lze řešit (pro libovolné S) stejným způsobem, viz rov. (6) a rov. (7),

$$s_\pm = s_x \pm is_y \qquad \Rightarrow \qquad [s_+, s_-] = 2s_z, \qquad \dot{s}_\pm = \mp ib\, s_\pm, \tag{34}$$

což vede k periodickému pohybu s frekvencí $\omega = b$

- ve speciálním případě $S = 1/2$ splňují zavedené operátory $s_\pm$ vztahy

$$s_+ = \begin{pmatrix} 0 & 1 \\ 0 & 0 \end{pmatrix}, \qquad s_- = \begin{pmatrix} 0 & 0 \\ 1 & 0 \end{pmatrix}, \qquad s_z = \frac{1}{2} - s_- s_+, \tag{35}$$

a dále platí následující identity

$$\begin{gathered} s_x^2 = s_y^2 = s_z^2 = \frac{1}{4}, \qquad s_+^2 = s_-^2 = 0, \qquad s_+ = s_-^+, \\ s_+|\uparrow\rangle = 0, \qquad s_+|\downarrow\rangle = |\uparrow\rangle, \qquad s_-|\downarrow\rangle = 0, \qquad s_-|\uparrow\rangle = |\downarrow\rangle. \end{gathered} \tag{36}$$

Tyto relace ukazují, že pro spinové stavy poblíž ‘severního pólu’ lze operátor $s_- s_+$ považovat za ‘malý’.

• pro kvantový feromagnet s $S = 1/2$ na Bravaisově mřížce jsou vztahy podobné jejich klasickým protějškům; tvar hamiltoniánu volíme, viz rov. (1),

$$H \;=\; -\sum_{mn} J_{mn}\,\mathbf{s}_m \cdot \mathbf{s}_n \;-\; b\sum_m s_{mz}\,, \tag{37}$$

kde $\mathbf{s}_m = (s_{mx}, s_{my}, s_{mz})$ a kde komutační relace mezi složkami spinových operátorů $\mathbf{s}_m$ a $\mathbf{s}_n$ jsou

$$[s_{mx}, s_{ny}] \;=\; i\delta_{mn} s_{mz} \;\approx\; \frac{i}{2}\delta_{mn}\,, \tag{38}$$

což odpovídá Poissonovým závorkám v rov. (16)

• operátory $s_{m\pm}$ jsou definovány pomocí

$$s_{m\pm} = s_{mx} \pm i s_{my} \qquad \Rightarrow \qquad [s_{m+}, s_{n-}] = \delta_{mn}\,, \tag{39}$$

takže původní složky s_{mx}, s_{my} a s_{mz} lze vyjádřit jako

$$s_{mx} = \frac{s_{m+} + s_{m-}}{2}\,, \quad s_{my} = -i\,\frac{s_{m+} - s_{m-}}{2}\,, \quad s_{mz} = \frac{1}{2} - s_{m-}s_{m+}\,, \tag{40}$$

viz též rov. (35)

• k vyjádření hamiltoniánu, rov. (37), pomocí $s_{m\pm}$ využijeme

$$\begin{aligned} s_{mx}s_{nx} + s_{my}s_{ny} \;&=\; \frac{1}{2}(s_{m+}s_{n-} + s_{m-}s_{n+})\,, \\ s_{mz}s_{nz} \;&\approx\; \frac{1}{4} - \frac{1}{2}(s_{m-}s_{m+} + s_{n-}s_{n+})\,, \end{aligned} \tag{41}$$

kde ve druhém vztahu jsme zanedbali člen $s_{m-}s_{m+}s_{n-}s_{n+}$ (součin dvou 'malých' operátorů); to vede na tvar

$$H \;=\; (\mathcal{J} + b)\sum_m s_{m-}s_{m+} \;-\; \sum_{mn} J_{mn}\, s_{m-}s_{n+}\,, \tag{42}$$

kde jsme vynechali aditivní konstantu. Tento výsledek se shoduje s klasickým výrazem rov. (15); všimněme si pořadí operátorů s_{m-} a s_{n+}, důležité zejména v prvním členu

• pohybová rovnice pro operátory s_{m-} plyne z rov. (32), rov. (39) a rov. (42):

$$\dot{s}_{j-} \;=\; i[H, s_{j-}] \;=\; i(\mathcal{J} + b)s_{j-} \;-\; i\sum_n J_{jn}s_{n-}\,, \tag{43}$$

což je soustava lineárních rovnic shodná s klasickou rov. (17)

• mřížková Fourierova transformace vedoucí k operátorům $\tilde{s}_\pm(\mathbf{k})$ a její inverze jsou shodné s rov. (18) a rov. (20); podobně dostaneme

$$\tilde{s}_+(\mathbf{k}) = \tilde{s}_-^+(\mathbf{k})\,, \qquad [\tilde{s}_+(\mathbf{k}), \tilde{s}_-(\mathbf{k}')] = \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'}\,, \tag{44}$$

jakožto kvantové protějšky klasických vztahů, rov. (19) a rov. (21); pohybová rovnice pro operátor $\tilde{s}_-(\mathbf{k})$ je shodná s klasickou rov. (22), což dává shodný magnonový disperzní zákon $\omega(\mathbf{k})$

• vyjádření hamiltoniánu, rov. (42), pomocí operátorů $\tilde{s}_\pm(\mathbf{k})$ lze získat stejným způsobem jako v případě klasickém; výsledek je

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \tilde{s}_-(\mathbf{k}) \tilde{s}_+(\mathbf{k})\,, \tag{45}$$

který se liší od klasické rov. (23) pouze pořadím $\tilde{s}_-(\mathbf{k})$ a $\tilde{s}_+(\mathbf{k})$ a který dokazuje ekvivalenci kvantového feromagnetu se systémem nezávislých lineárních harmonických oscilátorů

• kvantové statistické vlastnosti hamiltoniánu H, rov. (45), vedou ke vztahům analogickým s rov. (24), totiž,

$$\begin{aligned} \langle \tilde{s}_-(\mathbf{k}) \tilde{s}_+(\mathbf{k}') \rangle &= \delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \langle \tilde{s}_-(\mathbf{k}) \tilde{s}_+(\mathbf{k}) \rangle\,, \\ \langle \tilde{s}_-(\mathbf{k}) \tilde{s}_+(\mathbf{k}) \rangle &= \frac{1}{\exp[\beta\omega(\mathbf{k})] - 1}\,, \end{aligned} \tag{46}$$

kde druhý vztah odráží kvantové statistické vlastnosti jediného lineárního harmonického oscilátoru a představuje též speciální případ Bose-Einsteinovy distribuční funkce

• operátor s_{mz} lze vyjádřit z rov. (40) a rov. (20) jako

$$s_{mz} = \frac{1}{2} - s_{m-}s_{m+} = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \exp[i(\mathbf{k}' - \mathbf{k}) \cdot \mathbf{T}_m]\, \tilde{s}_-(\mathbf{k}) \tilde{s}_+(\mathbf{k}')\,,$$

takže jeho kvantová statistická střední hodnota vede s pomocí rov. (46) a pro $b = 0$ na

$$\begin{aligned} \langle s_{mz} \rangle &= \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \tilde{s}_-(\mathbf{k}) \tilde{s}_+(\mathbf{k}) \rangle = \frac{1}{2} - \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\exp[\beta\omega(\mathbf{k})] - 1} \\ &\approx \frac{1}{2} - \frac{1}{\Omega_{BZ}} \int_{BZ} \frac{1}{\exp(\beta D k^2) - 1}\, \mathrm{d}^3\mathbf{k} \\ &\approx \frac{1}{2} - \frac{4\pi}{\Omega_{BZ}} \int_0^\infty \frac{k^2}{\exp(\beta D k^2) - 1}\, \mathrm{d}k \\ &= \frac{1}{2} - \frac{2\pi}{\Omega_{BZ}} (\beta D)^{-3/2} \int_0^\infty \frac{y^{1/2}}{\exp(y) - 1}\, \mathrm{d}y\,, \end{aligned} \tag{47}$$

kde Ω_{BZ} značí objem 1. Brillouinovy zóny a kde jsme aproximovali disperzní zákon $\omega(\mathbf{k}) \approx Dk^2$; výsledná teplotní závislost je tak

$$\langle s_{mz} \rangle \;=\; \frac{1}{2} \,-\, AT^{3/2} \,, \tag{48}$$

kde A je konstanta; tento výsledek je Blochův 3/2-ový zákon

• provedené odvození rov. (48) ukazuje, že Blochův zákon má původ v tepelné excitaci kolektivních módů (magnonů) s kvadratickou disperzní závislostí; jejich vlastnosti při konečných teplotách vyžadují použití kvantové statistiky

• poznamenejme, že střední hodnoty (integrály) přes 1. Brillouinovu zónu v rov. (25) a rov. (47) jsou konečné ve třídimenzionálních systémech, ale divergují v nižších dimenzích. Tato skutečnost má těsnou souvislost s Mermin-Wagnerovým teorémem o absenci spontánních magnetických uspořádání pro isotropní Heisenbergovy modely v dimenzích jedna a dvě.

3 Magnony v antiferomagnetech

• uvažujme jednoduchý Heisenbergův model antiferomagnetu na Bravaisově mřížce; jeho klasický hamiltonián je

$$H \;=\; -\,\frac{1}{2}\sum_{mn} J_{mn}\left(\mathbf{s}_m\cdot\mathbf{s}_n + \mathbf{r}_m\cdot\mathbf{r}_n\right) \,+\, L\sum_m \mathbf{s}_m\cdot\mathbf{r}_m \,, \tag{49}$$

kde $\mathbf{s}_m$ a $\mathbf{r}_m$ jsou dva jednotkové vektory spjaté s m-tým uzlem mřížky; vektory $\mathbf{s}_m$ leží při 'severním pólu', zatímco vektory $\mathbf{r}_m$ leží při 'jižním pólu'; párové výměnné interakce J_{mn} jsou feromagnetické ($J_{mn} \geq 0$) a veličina $L > 0$ definuje lokální antiferomagnetickou interakci

• podobně jako v Sekci 1 můžeme použít přiblížení

$$s_{mz} \;\approx\; 1 - \frac{s_{mx}^2 + s_{my}^2}{2} \,, \qquad r_{mz} \;\approx\; -1 + \frac{r_{mx}^2 + r_{my}^2}{2} \,, \tag{50}$$

a zavést komplexní proměnné

$$s_{m\pm} \;=\; \frac{s_{mx} \pm i s_{my}}{\sqrt{2}} \,, \qquad r_{m\pm} \;=\; \frac{r_{mx} \pm i r_{my}}{\sqrt{2}} \,, \tag{51}$$

což vede ke vztahům

$$\begin{aligned}
\mathbf{s}_m\cdot\mathbf{s}_n &\;\approx\; 1 + s_{m+}s_{n-} + s_{m-}s_{n+} - s_{m+}s_{m-} - s_{n+}s_{n-} \,, \\
\mathbf{r}_m\cdot\mathbf{r}_n &\;\approx\; 1 + r_{m+}r_{n-} + r_{m-}r_{n+} - r_{m+}r_{m-} - r_{n+}r_{n-} \,, \\
\mathbf{s}_m\cdot\mathbf{r}_m &\;\approx\; -1 + s_{m+}r_{m-} + s_{m-}r_{m+} + s_{m+}s_{m-} + r_{m+}r_{m-} \,,
\end{aligned} \tag{52}$$

které lze použít v původním hamiltoniánu, rov. (49). Výsledná nová forma hamiltoniánu je

$$\begin{aligned} H &= -\sum_{mn} J_{mn}\left(s_{m+}s_{n-} + r_{m+}r_{n-}\right) \\ &\quad + (\mathcal{J} + L)\sum_{m}\left(s_{m+}s_{m-} + r_{m+}r_{m-}\right) \\ &\quad + L\sum_{m}\left(s_{m+}r_{m-} + s_{m-}r_{m+}\right), \end{aligned} \tag{53}$$

kde veličina $\mathcal{J} > 0$ je definována v rov. (10) a kde byl vypuštěn konstantní člen.

• dynamika generovaná hamiltoniánem H, rov. (53), plyne z přibližných Poissonových závorek

$$\{s_{m-}, s_{n+}\} = i\delta_{mn}\,, \qquad \{r_{m-}, r_{n+}\} = -i\delta_{mn}\,, \tag{54}$$

jakož i z dalších triviálních závorek, jako např. $\{s_{m-}, r_{n\pm}\} = \{s_{m+}, r_{n\pm}\} = 0$. Výsledné pohybové rovnice jsou

$$\begin{aligned} \dot{s}_{j-} &= i\left[-\sum_{n} J_{jn}s_{n-} + (\mathcal{J}+L)s_{j-} + Lr_{j-}\right], \\ \dot{r}_{j-} &= -i\left[-\sum_{n} J_{jn}r_{n-} + (\mathcal{J}+L)r_{j-} + Ls_{j-}\right], \end{aligned} \tag{55}$$

což představuje zobecnění feromagnetického případu, viz rov. (17).

• mřížková Fourierova transformace všech veličin se zavádí shodně s předchozí rov. (18) [vztahy $\tilde{r}_{\pm}(\mathbf{k}) \leftrightarrow r_{n\pm}$ a $\tilde{s}_{\pm}(\mathbf{k}) \leftrightarrow s_{n\pm}$ jsou shodné], což vede k pohybovým rovnicím pro $\tilde{s}_{-}(\mathbf{k})$ a $\tilde{r}_{-}(\mathbf{k})$, tj.,

$$\begin{aligned} \dot{\tilde{s}}_{-}(\mathbf{k}) &= i\left[M(\mathbf{k})\tilde{s}_{-}(\mathbf{k}) + L\tilde{r}_{-}(\mathbf{k})\right], \qquad M(\mathbf{k}) = L + \mathcal{J} - \tilde{J}(\mathbf{k})\,, \\ \dot{\tilde{r}}_{-}(\mathbf{k}) &= -i\left[M(\mathbf{k})\tilde{r}_{-}(\mathbf{k}) + L\tilde{s}_{-}(\mathbf{k})\right], \end{aligned} \tag{56}$$

které jsou vzájemně svázané díky antiferomagnetické interakci L

• fundamentální řešení rov. (56) jsou charakterizována speciální časovou závislostí, $\tilde{q}_{-}(\mathbf{k}, t) \propto \exp[i\omega(\mathbf{k})t]$, $q = r, s$, což vede na zřejmý problém vlastních hodnot:

$$\begin{vmatrix} M(\mathbf{k}) - \omega(\mathbf{k}) & L \\ L & M(\mathbf{k}) + \omega(\mathbf{k}) \end{vmatrix} = 0\,, \tag{57}$$

který umožňuje explicitní vyjádření frekvence $\omega(\mathbf{k})$ jako

$$\omega^2(\mathbf{k}) = \left[\mathcal{J} - \tilde{J}(\mathbf{k})\right]\left[2L + \mathcal{J} - \tilde{J}(\mathbf{k})\right], \tag{58}$$

kde pravá strana je vždy nezáporná díky přijatým předpokladům o výměnných interakcích J_{mn} a L

• výsledný magnonový disperzní zákon, rov. (58), se pro $L = 0$ redukuje na případ feromagnetu, rov. (22), zatímco pro $L > 0$ se kvalitativně liší pro malé vektory $\mathbf{k}$: platí $\omega(\mathbf{k}) \approx (2LD)^{1/2}k$ pro $k \to 0$, kde D značí spinovou tuhost feromagnetické párové interakce J_{mn}, tj. $\mathcal{J} - \tilde{J}(\mathbf{k}) \approx Dk^2$ pro $k \to 0$; lineární disperze pro antiferomagnetické magnony vede (v kombinaci s kvantovou statistikou) k odlišnému nízkoteplotnímu chování různých veličin (magnetizace podmřížek, měrné teplo) antiferomagnetů ve srovnání s feromagnety s kvadratickou disperzí magnonů

• úplné řešení modelu vyžaduje vlastní vektory problému v rov. (57). To vede na veličiny

$$u(\mathbf{k}) = \frac{L}{\sqrt{L^2 - [\omega(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k})]^2}} \,, \quad v(\mathbf{k}) = \frac{\omega(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k})}{\sqrt{L^2 - [\omega(\mathbf{k}) - M(\mathbf{k})]^2}} \,, \tag{59}$$

kde $\omega(\mathbf{k}) \geq 0$ splňuje rov. (58); normalizace se volí jako

$$u^2(\mathbf{k}) - v^2(\mathbf{k}) = 1 \,, \tag{60}$$

a nové dynamické proměnné $a_\mu(\mathbf{k})$, $\mu = 1, 2$, se pak zavedou vztahy

$$\begin{aligned} \tilde{s}_+(\mathbf{k}) &= u(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + v(\mathbf{k})a_2^*(\mathbf{k}) \,, \\ \tilde{r}_+(\mathbf{k}) &= v(\mathbf{k})a_1(\mathbf{k}) + u(\mathbf{k})a_2^*(\mathbf{k}) \,. \end{aligned} \tag{61}$$

Lze dokázat, že Poissonovy závorky mezi novými proměnnými splňují

$$\{a_\mu^*(\mathbf{k}), a_\nu(\mathbf{k}')\} = i\delta_{\mu\nu}\delta_{\mathbf{k}\mathbf{k}'} \,, \qquad \{a_\mu(\mathbf{k}), a_\nu(\mathbf{k}')\} = 0 \,, \tag{62}$$

a že hamiltonián H, rov. (53), lze psát ve tvaru

$$H = \sum_{\mathbf{k}} \omega(\mathbf{k}) \left[a_1(\mathbf{k})a_1^*(\mathbf{k}) + a_2(\mathbf{k})a_2^*(\mathbf{k})\right] . \tag{63}$$

Naznačený postup představuje speciální případ Bogoljubovovy transformace; výsledné rov. (62) a rov. (63) dokazují ekvivalenci antiferomagnetu se systémem nezávislých lineárních harmonických oscilátorů.