14 Magnonen

14.a Ferromagnet

Wir gehen aus von einem Modell wechselwirkender Spins $\mathbf{S}_\mathbf{r}$, die an Gitterplätzen lokalisiert sind. Der Hamilton-Operator sei

$$H = -\frac{J}{2}\sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}} \mathbf{S}_\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g\mu_\mathrm{B}\mathbf{H}_0 \cdot \sum_\mathbf{r} \mathbf{S}_\mathbf{r}, \tag{14.1}$$

wobei $\mathbf{d}$ über die nächsten Nachbarn läuft. Da jedes Spin-Produkt in der Summe zweimal vorkommt, haben wir den Faktor $\frac{1}{2}$ eingeführt. Der Operator des Gesamtspins ist

$$\mathbf{S}_\mathrm{tot} = \sum_\mathbf{r} \mathbf{S}_\mathbf{r}. \tag{14.2}$$

Ist J positiv, dann ist es energetisch günstig, wenn sich die Spins alle parallel einstellen. Es ergibt sich ein Zustand mit Gesamtspin NS. Ohne Magnetfeld ist der Zustand $2NS+1$-fach entartet. Ist das Magnetfeld positiv, so ist der Zustand mit maximalem S^z energetisch am günstigsten und man hat für den Grundzustand $|0\rangle$

$$\mathbf{S}_\mathrm{tot} \cdot \mathbf{S}_\mathrm{tot}|0\rangle = NS(NS+1)|0\rangle, \quad S^z_\mathrm{tot}|0\rangle = NS|0\rangle. \tag{14.3}$$

14.a.α Spinwellen-Näherung

Wir betrachten zunächst die Spinwellen-Näherung. Dazu verwenden wir die Bewegungsgleichung

$$\mathrm{i}\hbar\dot{A} = [A, H], \tag{14.4}$$

die aus

$$\mathrm{i}\hbar\frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t}\langle\psi|A|\psi\rangle = \langle\psi|[A,H]|\psi\rangle \tag{14.5}$$

folgt. Abgesehen von der Termen in der Wechselwirkung, die nicht vom Spin $\mathbf{S}_\mathbf{r}$ abhängen, können wir die Wechselwirkung in der Form

$$\mathbf{S}_\mathbf{r} \cdot \mathbf{f}, \quad \mathbf{f} = -J\sum_\mathbf{d} \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g\mu_\mathrm{B}\mathbf{H}_0 \tag{14.6}$$

schreiben. Es folgt dann

$$\mathrm{i}\hbar\dot{S}^\alpha_\mathbf{r} = [S^\alpha_\mathbf{r}, S^\beta_\mathbf{r}]f^\beta = \mathrm{i}\epsilon^{\alpha\beta\gamma}S^\gamma_\mathbf{r} f^\beta = -\mathrm{i}(\mathbf{S}\times\mathbf{f})^\alpha, \tag{14.7}$$

also

$$\hbar\dot{\mathbf{S}}_\mathbf{r} = \mathbf{S}_\mathbf{r} \times (J\sum_\delta \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + g\mu_\mathrm{B}\mathbf{H}_0). \tag{14.8}$$

Der Spin präzessiert um ein effektives Magnetfeld, das sich aus dem angelegten Magnetfeld $\mathbf{H}_0$ und dem Wechselwirkungs-Magnetfeld der Nachbar-Spins zusammensetzt.

Wir wollen nun annehmen, dass das Magnetfeld in z-Richtung ausgerichtet ist, und dass die Spins im Mittel in z-Richtung ausgerichtet sind. Wir ersetzen daher die Faktoren $S^z_\mathbf{r}$ jeweils durch $\langle S^z\rangle$

$$\hbar\dot{S}^x_\mathbf{r} = (Jz\langle S^z\rangle + g\mu_\mathrm{B}H_0)S^y_\mathbf{r} - J\langle S^z\rangle\sum_\mathbf{d} S^y_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}, \tag{14.9}$$

$$\hbar\dot{S}^y_\mathbf{r} = -(Jz\langle S^z\rangle + g\mu_\mathrm{B}H_0)S^x_\mathbf{r} + J\langle S^z\rangle\sum_\mathbf{d} S^x_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}. \tag{14.10}$$

Setzen wir nun ebene Wellen in einem primitiven Gitter an,

$$S^x_\mathbf{r} = A\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\mathrm{i}\omega t}, \quad S^y_\mathbf{r} = B\mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}-\mathrm{i}\omega t}, \tag{14.11}$$

so folgt

$$
\begin{aligned}
-\mathrm{i}\hbar\omega A &= \hbar\omega_{\mathbf{k}} B, && (14.12)\\
-\mathrm{i}\hbar\omega B &= -\hbar\omega_{\mathbf{k}} A, && (14.13)\\
\gamma_{\mathbf{k}} &= \frac{1}{z}\sum_{\mathbf{d}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{d}}, && (14.14)\\
\hbar\omega_{\mathbf{k}} &= J\langle S^z\rangle(1-\gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_{\mathrm{B}} H_0, && (14.15)
\end{aligned}
$$

wobei $\omega_{\mathbf{k}}$ die Eigenfrequenzen der Magnonen sind. Für kleines $\mathbf{k}$ ist

$$
z(1-\gamma_{\mathbf{k}}) \approx \frac{1}{2}\sum_{\mathbf{d}}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{d})^2, \tag{14.16}
$$

so dass man Anregungsenergien

$$
\hbar\omega_{\mathbf{k}} \approx g\mu_{\mathrm{B}} H_0 + \frac{J\langle S^z\rangle}{2}\sum_{\mathbf{d}}(\mathbf{k}\cdot\mathbf{d})^2 \tag{14.17}
$$

findet, was sich für ein einfach kubisches, kubisch raumzentriertes und kubisch flächenzentriertes Gitter der Gitterkonstante a auf

$$
\hbar\omega_{\mathbf{k}} = g\mu_{\mathrm{B}} H_0 + J\langle S^z\rangle(ka)^2 \tag{14.18}
$$

reduziert, was wir auch

$$
\hbar\omega_{\mathbf{k}} = g\mu_{\mathrm{B}} H_0 + \hbar^2 k^2/(2m^*) \tag{14.19}
$$

mit $J\langle S^z\rangle a^2 = \hbar^2/(2m^*)$ schreiben können.

14.a.β Behandlung mit der Holstein-Primakoff-Transformation

Holstein und Primakoff drücken die Spin-Operatoren durch Bose-Operatoren $a^\dagger_{\mathbf{r}}$ und $a_{\mathbf{r}}$ aus

$$
\begin{aligned}
S^+_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} + iS^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}(1-a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}a_{\mathbf{r}}, && (14.20)\\
S^-_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} - iS^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}a^\dagger_{\mathbf{r}}(1-a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}, && (14.21)\\
S^z_{\mathbf{r}} &= S - a^\dagger_{\mathbf{r}}a_{\mathbf{r}}. && (14.22)
\end{aligned}
$$

Man beachtet zunächst, dass $S^+_{\mathbf{r}}$ und $S^-_{\mathbf{r}}$ hermitesch adjungiert zueinander sind. Man überzeugt sich davon, dass diese Operatoren die richtigen Eigenschaften haben. Für den Kommutator

$$
\begin{aligned}
[S^z, S^+] &= (S-a^\dagger a)\sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}a - \sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}a(S-a^\dagger a)\\
&= \sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}[S-a^\dagger a, a] = \sqrt{2S}(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}a = S^+. && (14.23)
\end{aligned}
$$

Dabei haben wir verwendet, dass $(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}$ mit $a^\dagger a$ kommutiert, da ersteres nur von $a^\dagger a$ abhängt. Ähnlich zeigt man $[S^z, S^-] = -S^-$. Weiter findet man

$$
\begin{aligned}
S^-S^+ &= 2Sa^\dagger(1-a^\dagger a/(2S))a = 2Sa^\dagger a - a^\dagger a^\dagger aa, && (14.24)\\
S^+S^- &= 2S(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}aa^\dagger(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}\\
&= 2S(1-a^\dagger a/(2S))(1+a^\dagger a) = 2S + (2S-2)a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger aa. && (14.25)
\end{aligned}
$$

Dabei haben wir verwendet, dass $aa^\dagger = a^\dagger a + 1$ ist und dies mit $(1-a^\dagger a/(2S))^{1/2}$ kommutiert. Hieraus lesen wir ab, dass

$$
\begin{aligned}
[S^+, S^-] &= 2S - 2a^\dagger a = 2S^z, && (14.26)\\
\mathbf{S}\cdot\mathbf{S} &= \frac{1}{2}(S^+S^- + S^-S^+) + S^{z2}\\
&= S + (2S-1)a^\dagger a - a^\dagger a^\dagger aa + (S-a^\dagger a)^2 = S(S+1). && (14.27)
\end{aligned}
$$

Damit ist der Nachweis erbracht, dass man die Spin-Operatoren auf diese Weise darstellen kann. Wir haben hier nur die Spinkomponenten des Spins am gleichen Ort betrachtet. Es ist offensichtlich, dass diese an verschiedenen Orten kommutieren, da auch die zugehörigen Bose-Operatoren kommutieren. Wir beobachten, dass aber die Anwendung der Bose-Operatoren auf $a^\dagger a \le 2S$ beschränkt ist, da sonst die Wurzel aus einem negativen Ausdruck zu ziehen ist. In Näherungen wird dies nicht immer berücksichtigt, so dass diese dann nur für $\langle a^\dagger a\rangle \ll 2S$ gültig sind.

Für sehr niedrige Temperaturen kann man

$$S^+_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}a, \quad S^-_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S}a^\dagger \tag{14.28}$$

approximieren. Vernachlässigt man im Produkt

$$S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{r}'} = (S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}})(S - a^\dagger_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}) \approx S^2 - S(a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} + a^\dagger_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}) \tag{14.29}$$

den Anteil $a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} a^\dagger_{\mathbf{r}'} a_{\mathbf{r}'}$, das heißt überall im Hamilton-Operator Beiträge, die Produkte aus vier Bosonen-Operatoren enthalten, so bleibt

$$\begin{aligned} H &= -\frac{J}{2}\sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}}\left(\frac{1}{2}(S^+_{\mathbf{r}} S^-_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + S^-_{\mathbf{r}} S^+_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}) + S^z_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}\right) - g\mu_{\mathrm{B}} H_0 \sum_{\mathbf{r}} S^z_{\mathbf{r}} \\ &= -\frac{JS}{2}\sum_{\mathbf{rd}}\left(a^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} a_{\mathbf{r}} + a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} - a^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} a_{\mathbf{r}+\mathbf{d}}\right) - g\mu_{\mathrm{B}} H_0 \sum_{\mathbf{r}} (S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}) \end{aligned} \tag{14.30}$$

Wir können nun die Bose-Operatoren wieder der Fourier-Transformation unterwerfen

$$a^\dagger_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}}, \quad a_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{a}_{\mathbf{k}} \tag{14.31}$$

und erhalten

$$H = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} (JzS(1-\gamma_{\mathbf{k}}) + g\mu_{\mathrm{B}} H_0)\, \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}}, \quad E_0 = -\frac{J}{2} NzS^2 - g\mu_{\mathrm{B}} H_0 NS. \tag{14.32}$$

Durch Berücksichtigung der Terme vierter Ordnung in den Bose-Operatoren kann man dann Korrekturen bei höheren Temperaturen bestimmen.

14.a.γ Spezifische Wärme und Magnetisierung

Wir wollen noch die Energie und die Magnetisierung bei tiefen Temperaturen und ohne äußeres Feld, $H_0 = 0$, betrachten. Für die Energie ergibt sich

$$E = E_0 + \sum_{\mathbf{k}} \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1} = E_0 + \frac{V_{\mathrm{P}}}{(2\pi)^3}\int \mathrm{d}^3k \frac{\hbar\omega_{\mathbf{k}}}{\mathrm{e}^{\beta\hbar\omega_{\mathbf{k}}} - 1}. \tag{14.33}$$

Mit $\mathrm{d}^3k = 4\pi k^2 \mathrm{d}k$ und der Substitution $z = \beta\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \beta\hbar^2 k^2/(2m^*)$ folgt

$$E = E_0 + \frac{V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} T (2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2 \hbar^3}\int \frac{z^{3/2}\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^z - 1} = E_0 + \frac{\Gamma(5/2)\zeta(5/2) V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} T (2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3}. \tag{14.34}$$

Der Beitrag zur spezifischen Wärme ergibt sich zu

$$C_{\mathrm{V}} = \frac{\mathrm{d}E}{\mathrm{d}T} = \frac{5\Gamma(5/2)\zeta(5/2) V_{\mathrm{P}} k_{\mathrm{B}} (2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{8\pi^2\hbar^3}. \tag{14.35}$$

Die spontane Magnetisierung ergibt sich ganz analog zu

$$\begin{aligned} M(T) &= g\mu_{\mathrm{B}} \langle S^z\rangle = g\mu_{\mathrm{B}}(NS - \sum_{\mathbf{k}} n_{\mathbf{k}}) \\ &= g\mu_{\mathrm{B}}(NS - \frac{V_{\mathrm{P}}(2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3}\int \frac{z^{1/2}\mathrm{d}z}{\mathrm{e}^z - 1}) \\ &= M(0) - g\mu_{\mathrm{B}} \frac{\Gamma(3/2)\zeta(3/2) V_{\mathrm{P}}(2m^* k_{\mathrm{B}} T)^{3/2}}{(2\pi)^2\hbar^3)^{3/2}}. \end{aligned} \tag{14.36}$$

Es gilt also sowohl für die spezifische Wärme wie auch für die Abnahme der Magnetisierung ein $T^{3/2}$-Gesetz.

Dabei ist $\zeta(\nu)$ die Riemannsche ζ-Funktion

$$\zeta(\nu) = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^\nu} \tag{14.37}$$

Der Zusammenhang ergibt sich auf folgende Weise

$$\int_0^\infty \frac{z^\nu \mathrm{d}z}{\mathrm{e}^z - 1} = \int_0^\infty \frac{z^\nu \mathrm{e}^{-z} \mathrm{d}z}{1 - \mathrm{e}^{-z}} = \int_0^\infty z^\nu \sum_{n=1}^{\infty} \mathrm{e}^{-nz} \mathrm{d}z = \Gamma(\nu+1) \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^{\nu+1}} = \Gamma(\nu+1)\zeta(\nu+1). \tag{14.38}$$

Man findet speziell $\Gamma(3/2)\zeta(3/2) = 2.315$, $\Gamma(5/2)\zeta(5/2) = 1.783$.

14.b Antiferromagnet

14.b.α Spinwellen-Näherung

Wir betrachten nun ein Gitter mit Spins, zwischen denen eine antiferromagnetische Kopplung besteht. Wir wollen annehmen, dass man das Gitter in zwei Untergitter A und B zerlegen kann, so dass nur jeweils eine Wechselwirkung zwischen Spins auf zwei verschiedenen Untergittern besteht. Das heißt im Hamilton-Operator

$$H = J \sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}} \mathbf{S}_\mathbf{r} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - g_A H_{0A} \mu_\mathrm{B} \sum_{\mathbf{r}\in A} S^z_\mathbf{r} - g_B H_{0B} \mu_\mathrm{B} \sum_{\mathbf{r}\in B} S^z_\mathbf{r} \tag{14.39}$$

wollen wir annehmen, dass alle Orte $\mathbf{r}$ auf dem Untergitter A, alle Orte $\mathbf{r}+\mathbf{d}$ aber auf dem Untergitter B liegen. Als Beispiel kann man sich vorstellen, dass auf einem einfachen Gitter mit den Gitterpunkten $\mathbf{R}_n = n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ die Gitterpunkte mit geradem $n_1 + n_2 + n_3$ zum Untergitter A, die mit ungeradem zum Untergitter B gehören. Auf einem zentrierten Gitter gehören etwa die mit den Gitterpunkten $n_1\mathbf{a}_1 + n_2\mathbf{a}_2 + n_3\mathbf{a}_3$ zu A, die mit $(n_1 + 1/2)\mathbf{a}_1 + (n_2 + 1/2)\mathbf{a}_2 + (n_3 + 1/2)\mathbf{a}_3$ zu B. Ein flächenzentriertes Gitter ist nicht geeignet.

Wir nehmen nun an, dass die Spins auf dem Untergitter A vorwiegend nach oben, die auf dem Untergitter B vorwiegend nach unten ausgerichtet sind auf Grund der antiferromagnetischen Wechselwirkung und äußerer (fiktiver) Magnetfelder $H_A \geq 0$, $H_B \leq 0$.

Wir führen nun wieder die Spinwellen-Näherung durch. Mit $S^+ = S^x + \mathrm{i}S^y$ folgt dann

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} S^+_{A\mathbf{r}} = (-Jz\langle S^z_b\rangle + g_A \mu_\mathrm{B} H_{0A}) S^+_{A\mathbf{r}} + J\langle S^z_A\rangle \sum_\mathbf{d} S^+_{B\mathbf{r}+\mathbf{d}}, \tag{14.40}$$

$$\mathrm{i}\hbar \frac{\mathrm{d}}{\mathrm{d}t} S^+_{B\mathbf{r}} = (-Jz\langle S^z_a\rangle + g_B \mu_\mathrm{B} H_{0B}) S^+_{B\mathbf{r}} + J\langle S^z_B\rangle \sum_\mathbf{d} S^+_{A\mathbf{r}+\mathbf{d}}. \tag{14.41}$$

Die Bestimmung der Anregungsfrequenzen für die ebenen Wellen reduziert sich dann auf die Bestimmung der Eigenwerte von

$$\begin{pmatrix} -Jz\langle S^z_b\rangle + g_A\mu_\mathrm{B} H_{0A} & Jz\langle S^z_a\rangle\gamma_\mathbf{k} \\ Jz\langle S^z_b\rangle\gamma_\mathbf{k} & -Jz\langle S^z_a\rangle + g_B\mu_\mathrm{B} H_{0B} \end{pmatrix}. \tag{14.42}$$

Speziell ohne äußeres Feld und für $\langle S^z_b\rangle = -\langle S^z_a\rangle$ ergibt sich

$$\hbar\omega_\mathbf{k} = +Jz\langle S^z_a\rangle\sqrt{1-\gamma^2_\mathbf{k}}. \tag{14.43}$$

Für kleine $\mathbf{k}$ folgt in diesem Fall aus dem ferromagnetischen Analogon $JSz(1-\gamma_\mathbf{k}) = \hbar^2k^2/(2m^*)$ für den antiferromagnetischen Fall $J\langle S^z_a\rangle\sqrt{1-\gamma^2_\mathbf{k}} = \hbar c^* k$, also eine lineare Dispersion mit der Magnonengeschwindigkeit c^*.

14.b.β Holstein-Primakoff-Transformation

Wir verwenden auf dem Untergitter A wieder die Darstellung (14.20-14.22) für die Spins, auf dem Untergitter B aber wegen der anderen Orientierung die Darstellung

$$\begin{aligned} S^+_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} + \mathrm{i} S^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S} b^\dagger_{\mathbf{r}} (1 - b^\dagger_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2}, & (14.44) \\ S^-_{\mathbf{r}} &= S^x_{\mathbf{r}} - \mathrm{i} S^y_{\mathbf{r}} = \sqrt{2S} (1 - b^\dagger_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}}/(2S))^{1/2} b_{\mathbf{r}}, & (14.45) \\ S^z &= b^\dagger_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}} - S. & (14.46) \end{aligned}$$

Man überzeugt sich leicht, dass auch hier die Kommutator-Relationen und das Quadrat des Spins die richtigen Werte ergeben. Wir führen wieder die harmonische Näherung durch und erhalten

$$\begin{aligned} H &= JS \sum_{\mathbf{r},\mathbf{d}} \left(a_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} + a^\dagger_{\mathbf{r}} b^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} - S + a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}} + b^\dagger_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} b_{\mathbf{r}+\mathbf{d}} \right) \\ &\quad - g_A H_{0A} \mu_{\mathrm{B}} \sum_{\mathbf{r} \in A} (S - a^\dagger_{\mathbf{r}} a_{\mathbf{r}}) + g_B H_{0B} \mu_{\mathrm{B}} \sum_{\mathbf{r} \in B} (S - b^\dagger_{\mathbf{r}} b_{\mathbf{r}}). \qquad (14.47) \end{aligned}$$

Wir führen jetzt wieder die Fourier-Transformation (14.31) und analog

$$b^\dagger_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}}, \quad b_{\mathbf{r}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \mathrm{e}^{-\mathrm{i}\mathbf{k}\cdot\mathbf{r}} \hat{b}_{\mathbf{k}} \qquad (14.48)$$

durch. Dann lässt sich der Hamilton-Operator

$$\begin{aligned} H &= E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\gamma_A \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{a}_{\mathbf{k}} + \gamma_B \hat{b}^\dagger_{\mathbf{k}} \hat{b}_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} \hat{a}_k \hat{b}_{-\mathbf{k}} + \gamma_{-\mathbf{k}} \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} b^\dagger_{\mathbf{k}} \right), & (14.49) \\ E_0 &= JS^2 z (1 - \gamma_A - \gamma_B), \quad \gamma_A = 1 + \frac{g_A H_{0A} \mu_{\mathrm{B}}}{JSz}, \quad \gamma_B = 1 - \frac{g_B H_{0B} \mu_{\mathrm{B}}}{JSz}. & (14.50) \end{aligned}$$

schreiben.

Um Grundzustandsenergie und Anregungsenergien zu finden, muss man den Hamilton-Operator diagonalisieren. Dies geschieht durch eine geeignete unitäre Transformation. Wir setzen

$$\begin{aligned} \hat{a}_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \beta^\dagger_{-\mathbf{k}}, & (14.51) \\ \hat{a}^\dagger_{\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \alpha^\dagger_{\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}, & (14.52) \\ \hat{b}_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha^\dagger_{\mathbf{k}}, & (14.53) \\ \hat{b}^\dagger_{-\mathbf{k}} &= u_{\mathbf{k}} \beta^\dagger_{-\mathbf{k}} - v_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}}. & (14.54) \end{aligned}$$

Wir setzen der Einfachheit halber voraus, dass u und v reell sind. Die Operatoren α und β werden als Bose-Operatoren vorausgesetzt. Man überzeugt sich, dass das äquivalent ist dazu, dass auch a und b Bose-Operatoren sind. Voraussetzung ist allerdings, dass $u^2_{\mathbf{k}} - v^2_{\mathbf{k}} = 1$ gilt. Diese Operatoren setzen wir nun in den Hamilton-Operator ein. Man erhält dann

$$\begin{aligned} H &= E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\gamma_A v^2_{\mathbf{k}} + \gamma_B v^2_{\mathbf{k}} - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right) \\ &+ JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\gamma_A u^2_{\mathbf{k}} + \gamma_B v^2_{\mathbf{k}} - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right) \alpha^\dagger_{\mathbf{k}} \alpha_{\mathbf{k}} \\ &+ JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\gamma_A v^2_{\mathbf{k}} + \gamma_B u^2_{\mathbf{k}} - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \right) \beta^\dagger_{-\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}} \\ &+ JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(-(\gamma_A + \gamma_B) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}}) \right) (\alpha^\dagger_{\mathbf{k}} \beta^\dagger_{-\mathbf{k}} + \alpha_{\mathbf{k}} \beta_{-\mathbf{k}}). \qquad (14.55) \end{aligned}$$

Wir verlangen nun, dass der Koeffizient bei den anormalen Termen $\alpha^\dagger \beta^\dagger + \alpha\beta$ verschwindet,

$$-(\gamma_A + \gamma_B) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \gamma_{\mathbf{k}} (u^2_{\mathbf{k}} + v^2_{\mathbf{k}}) = 0, \qquad (14.56)$$

woraus mit $u_{\mathbf{k}}^2 - v_{\mathbf{k}}^2 = 1$

$$u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \frac{\gamma_{\mathbf{k}}}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \quad u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2 = \frac{\gamma_A + \gamma_B}{2\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}}, \tag{14.57}$$

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{\left(\frac{\gamma_A + \gamma_B}{2}\right)^2 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}, \tag{14.58}$$

$$(\gamma_A + \gamma_B)\frac{u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2}{2} - 2\gamma_{\mathbf{k}} u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} = \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} \tag{14.59}$$

folgt. Damit reduziert sich der Hamilton-Operator auf

$$\begin{aligned} H &= E_0 + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(-\frac{\gamma_A + \gamma_B}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \\ &+ JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\gamma_A - \gamma_B}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \alpha_{\mathbf{k}}^\dagger \alpha_{\mathbf{k}} + JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\gamma_B - \gamma_A}{2} + \hat{\epsilon}_{\mathbf{k}}\right) \beta_{\mathbf{k}}^\dagger \beta_{\mathbf{k}}. \end{aligned} \tag{14.60}$$

Falls kein äußeres Magnetfeld anliegt, reduzieren sich mit $\gamma_A = \gamma_B = 1$ die Anregungsenergien auf $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = JSz\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}$ und für kleine k hat man $\hbar\omega_{\mathbf{k}} = \hbar c^* k$.

14.b.γ Spezifische Wärme und Untergittermagnetisierung

Unter der Annahme, dass keine äußeren Magnetfelder anliegen, wollen wir nun Energie und Untergitter-Magnetisierung bestimmen. Wir beobachten zunächst, dass in diesem Fall $\gamma_A = \gamma_B = 1$. Damit folgt

$$\hat{\epsilon}_{\mathbf{k}} = \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}. \tag{14.61}$$

Wir waren bei der Betrachtung ausgegangen von einem Zustand, in dem die Spins auf A nach oben, die auf B nach unten ausgerichtet sind. Solch einen Zustand bezeichnet man als Néel-Zustand. Tatsächlich ist der Grundzustand ein komplizierterer Zustand. Der hier berechnete Zustand stellt eine bessere Näherung dar, was man schon daran erkennt, dass seine Energie E_{g} niedriger als die Energie E_0 des Néel-Zustandes liegt,

$$E_{\mathrm{g}} = E_0 - JSz \sum_{\mathbf{k}} \left(1 - \sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}\right). \tag{14.62}$$

Die Magnetisierung des Untergitters A ergibt sich zu

$$M_A^z = g_A \mu_{\mathrm{B}} \sum_{\mathbf{k}} (S - \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle) = g_A \mu_{\mathrm{B}} NS - g_A \mu_{\mathrm{B}} \sum_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}}^2 = g_A \mu_{\mathrm{B}} N(S + \frac{1}{2}) - \frac{g_A \mu_{\mathrm{B}}}{2} \sum_{\mathbf{k}} \frac{1}{\sqrt{1 - \gamma_{\mathbf{k}}^2}}, \tag{14.63}$$

wobei wir $\hat{a}^\dagger \hat{a} = (u\alpha^\dagger - v\beta)(u\alpha - v\beta^\dagger)$ verwendet haben. Der Beitrag $(-v\beta)(-v\beta^\dagger)$ ergibt das v^2. Sie ist gegenüber dem des Néel-Zustands reduziert.

Zur spezifischen Wärme brauchen wir keine neue Rechnung anstellen. Wegen der linearen Dispersion wird die Rechnung wie bei akustischen Phononen durchgeführt und ergibt einen Beitrag zur spezifischen Wärme proportional zu T^3. Zu beachten ist, dass es zwei Magnonenäste an Stelle von drei akustischen Phononen-Ästen gibt.