

# BOSE-EINSTEINOVA KONDENZACIJA MAGNONOV

JAN ŠUNTAJS

Fakulteta za matematiko in fiziko  
Univerza v Ljubljani

Predstavljen je pojav Bose-Einsteinove kondenzacije magnonov v magnetnih izolatorjih. Najprej je razložena Bose-Einsteinova kondenzacija neinteragirajočih bozonov, nato so v obravnavo vključeni še šibko interagirajoči bozonski sistemi. V nadaljevanju je predstavljena preslikava med bozonskimi in spinskimi sistemi, ki nam omogoča poenostavljeno obravnavo Bose-Einsteinove kondenzacije magnonov v kvantnih antiferomagnetih. Na koncu so opisane najpogosteje uporabljane eksperimentalne tehnike za preučevanje pojava.

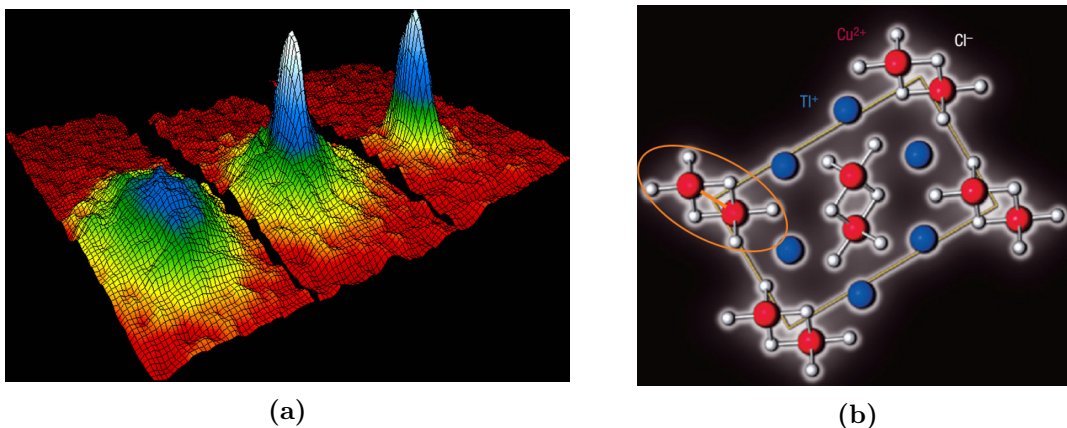
## BOSE-EINSTEIN CONDENSATION OF MAGNONS

The concept of Bose-Einstein condensation of magnons in magnetic insulators is presented. First, Bose-Einstein condensation of non-interacting bosons is described, after which weakly interacting bosonic systems are considered as well. A mapping between bosonic and spin systems is described next, which allows for a simplified analysis of Bose-Einstein condensation of magnons in quantum antiferromagnets. Finally, most commonly used experimental techniques are presented.

### 1. Uvod

Bose-Einsteinova kondenzacija je pojav, ko pri nizki temperaturi makroskopsko število delcev, za katere velja Bose-Einsteinova statistika, zavzame najnižje energijsko stanje. Pojav je zanimiv, saj ga podobno kot supertekočnosti in superprevodnosti ne moremo razložiti klasično. Pri vseh treh gre namreč za direktne posledice kvantne mehanike, kljub temu pa lahko kvantne lastnosti opazujemo na makroskopski ravni.

Obstoj Bose-Einsteinovega kondenzata je v članku o kvantni statistiki fotonov leta 1924 napovedal Satyendra Nath Bose, naslednjega leta pa je Einstein teorijo razširil z obravnavo masivnih delcev. Eksperimentalna potrditev teoretičnih napovedi je prišla šele leta 1995, ko sta ekipi Cornella in Weimana na Univerzi v Coloradu (Slika 1(a)) ter Wolfganga Ketterleja na MIT neodvisno druga od druge ustvarili kondenzata v plinu lasersko ohlajenih rubidijevih oziroma natrijevih atomov, za kar so vsi trije leta 2001 prejeli Nobelovo nagrado.



**Slika 1.** (a) Nastanek Bose-Einsteinovega kondenzata v plinu rubidijevih atomov, ohlajenih na 170 nK [2]. (b) Dimeri v spojini TiCuCl<sub>3</sub>, v kakršni opazujemo pojav Bose-Einsteinove kondenzacije magnonov [3].

Pobliže bomo spoznali Bose-Einsteinovo kondenzacijo v kvantnih antiferomagnetih. Matsuda in Matsubara [1] sta leta 1956 dokazala obstoj eksaktne preslikave med spini  $S = 1/2$  in bozoni s trdo

sredico<sup>1</sup>, zaradi katere lahko spine v kvantnem antiferomagnetu obravnavamo kot plin interagirajočih bozonov. Samo od sebe se torej poraja vprašanje, ali je tudi v kvantnih antiferomagnetih možna Bose-Einsteinova kondenzacija. Izkaže se, da je odgovor pritrdilen v primeru tistih antiferomagnetov, v katerih bližnji pari spinov  $S = 1/2$  tvorijo dimere s spinskim singletnim osnovnim stanjem ter tripletnimi vzbuditvami. Slednjim v bozonskem jeziku ustrezajo triploni, bozonski kvazidelci s spinom  $S = 1$ . Za tovrstne dimerizirane sisteme je bila Bose-Einsteinova kondenzacija napovedana in leta 1999 tudi eksperimentalno zabeležena [4] v magnetnem izolatorju  $\text{TlCuCl}_3$  (Slika 1(b)), področje pa odtelej zavoljo iskanja vedno novih materialov, v katerih bi prišlo do kondenzacije, ostaja zanimivo.

Uvodoma bodo predstavljene kvantnostatistične osnove Bose-Einsteinove kondenzacije v splošnem, hkrati bodo izpeljane tudi potrebne zveze med termodinamskimi količinami. V nadaljevanju bomo z uporabo transformacije Matsude in Matsubare pokazali na analogijo med spinskimi in bozonskimi sistemi, na koncu pa se bomo posvetili najpogosteje uporabljanim eksperimentalnim tehnikam.

## 2. Bose-Einsteinov kondenzat

V tem poglavju si bomo ogledali, kako iz dejstva, da se bozoni podrejšajo Bose-Einsteinovi statistiki, sledi fazni prehod v Bose-Einsteinov kondenzat, pri čemer bo bistvena izpeljava enačbe stanja, ki povezuje zasedbeno število delcev, kemijski potencial in (kritično) temperaturo. Pogoj za kondenzacijo bomo najprej izpeljali v skladu z Bose-Einsteinovo teorijo, ki ne upošteva meddelčnih interakcij oziroma delce obravnava kot plin neinteragirajočih bozonov, v nadaljevanju pa bo predstavljena še obravnava pojava v primeru šibke sklopitve med delci. Povsem splošna načela Bose-Einsteinove kondenzacije, ki jih bomo spoznali v tem poglavju, bomo lahko kasneje prepoznali in uporabili tudi pri obravnavi Bose-Einsteinove kondenzacije v kvantnih antiferomagnetih.

### 2.1 Bose-Einsteinov kondenzat plina neinteragirajočih bozonov

Za razliko od klasičnega in Fermijevega idealnega plina, pri katerih so delci porazdeljeni po Maxwell-Boltzmannovi oziroma Fermi-Diracovi porazdelitvi, nastopi pri Bose-Einsteinovem idealnem plinu termodinamski fazni prehod, ki ga imenujemo Bose-Einsteinova kondenzacija. Ker v modelu idealnega plina delci medsebojno ne interagirajo, je fazni prehod izključno posledica kvantne statistike.

Podobno kot pri običajnih termodinamskih faznih prehodih (denimo pri običajni kondenzaciji, torej prehodu med plinasto in kapljevinsko fazo v okviru Van der Waalsove teorije plinov) tudi prehod v Bose-Einsteinov kondenzat zaznamuje sprememba termodinamskih lastnosti sistema, ki definira kritično temperaturo  $T_c$ . Za razliko od navadnega kondenzata se pri Bose-Einsteinovi kondenzaciji kondenzirani delci od nekondenziranih ne ločijo v koordinatnem prostoru, temveč v prostoru gibalnih količin. Kondenzirani delci namreč vsi zasedejo najnižje dovoljeno energijsko stanje z ničelno gibalno količino, medtem ko je slednja pri nekondenziranih delcih različna od nič.

Pri izpeljavi bomo najprej upoštevali, da imamo opravka z bozoni, ki so porazdeljeni po Bose-Einsteinovi porazdelitvi<sup>2</sup>. Slednja nam pove, kolikšna je relativna zasedenost oziroma zasedbeno število energijskega nivoja z dano energijo:

<sup>1</sup>Ang. "hard core bosons", pri čemer trda sredica pomeni zelo močno odbojno interakcijo zelo kratkega dosega. Analogijo lahko posplošimo tudi na primere višjih spinov.

<sup>2</sup>Izpeljavo Bose-Einsteinove porazdelitve lahko bralec najde v številnih učbenikih statistične fizike, denimo v poglavju o Fermijevem in Bosejevem plinu v [5], zato se tu z njo ne bomo posebej ukvarjali, temveč jo bomo privzeli kot že poznano.

$$f_{\text{BE}}(\epsilon) = \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1}. \quad (1)$$

Pri tem  $\epsilon$  predstavlja energijo stanja,  $\mu$  kemijski potencial, iz termodinamike pa vemo, da velja  $\beta = \frac{1}{k_{\text{B}}T}$ . V kolikor osnovno stanje definiramo kot stanje z ničelno energijo, sledi za kemijski potencial pogoj

$$\mu \leq 0. \quad (2)$$

V nasprotnem primeru bi namreč enačba (1) dovoljevala tudi negativna zasedbena števila, kar ne bi imelo pravega fizikalnega pomena.

Naj bo naš sistem torej tridimenzionalni idealni plin  $N$  bozonov, ki zavzemajo volumen  $V$ , ob tem pa naj veljajo še periodični robni pogoji. Valovna funkcija vsakega delca je tedaj kar ravni val oblike

$$\psi(\mathbf{r}) = \frac{1}{\sqrt{V}} e^{i\mathbf{k}\mathbf{r}} \quad (3)$$

s pripadajočimi valovnimi vektorji

$$\mathbf{k} = \left( \frac{2\pi n_x}{L_x}, \frac{2\pi n_y}{L_y}, \frac{2\pi n_z}{L_z} \right). \quad (4)$$

$L_x, L_y, L_z$  predstavljajo dimenzije sistema, katerih produkt je enak volumnu sistema  $V$ . Volumen, ki v prostoru valovnih vektorjev  $\mathbf{k}$  pripada enemu stanju, je enak  $(2\pi)^3$ , torej je število stanj, ki se nahajajo v infinitezimalnem volumskem elementu prostora  $\mathbf{k}$ ,  $dk_x dk_y dk_z$ , enako

$$dN = \frac{V}{(2\pi)^3} d^3k. \quad (5)$$

Energijo vsakega izmed kvantnih stanj podaja disperzijska relacija (6) prostih delcev

$$\epsilon_{\mathbf{k}} = \frac{\hbar^2 \mathbf{k}^2}{2m}. \quad (6)$$

S pomočjo enačb (5) in (6) lahko zapišemo energijsko gostoto stanj  $g(\epsilon) = \frac{1}{V} \frac{dN}{dE}$  kot

$$g(\epsilon) = \frac{m^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2 \hbar^3} \epsilon^{1/2}. \quad (7)$$

V naslednjem koraku lahko ob predpostavki kontinuumske limite  $V \rightarrow \infty$  številsko gostoto stanj  $n = \frac{N}{V}$  zapišemo kot integral<sup>3</sup>:

$$n = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} g(\epsilon) d\epsilon \quad (8)$$

Enačba (8) predstavlja enačbo stanja v splošni obliki, saj določa številsko gostoto delcev  $n(\mu, T)$  kot funkcijo kemijskega potenciala  $\mu$  in temperature  $T$ , kar tudi iščemo. Ob upoštevanju zvez (6) in (7) prispemo z izračunom integrala do enačbe stanja za tridimenzionalni plin neinteragirajočih bozonov,

$$n = \left( \frac{mk_{\text{B}}T}{2\pi\hbar^2} \right)^{3/2} \text{Li}_{3/2} \left( e^{\frac{\mu}{T}} \right), \quad (9)$$

<sup>3</sup>Na tem mestu smo preskočili standarden korak prehoda z vsote zasedbenih števil po diskretnih energijskih stanjih na integral po kontinuumu. Celotno izpeljavo z vsemi vmesnimi koraki lahko bralec najde v poglavju o Bose-Einsteinovi kondenzaciji v [6].

kjer je  $\text{Li}_j(z)$  polilogaritemska funkcija, ki je definirana z vrsto kot

$$\text{Li}_j(z) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{z^p}{p^j}. \quad (10)$$

Kvocientni kriterij nam pove, da je vrsta konvergentna za  $|z| < 1$  in divergentna za  $|z| > 1$ , medtem ko je pri  $z = 1$  vrednost funkcije enaka

$$\text{Li}_{3/2}(1) = \xi\left(\frac{3}{2}\right) = 2.612, \quad (11)$$

kjer je  $\xi\left(\frac{3}{2}\right)$  Riemannova zeta funkcija

$$\xi(s) = \sum_{p=1}^{\infty} \frac{1}{p^s}.$$

Opazimo lahko še (Slika 2), da ima funkcija pri  $z = 1$  neskončen odvod.

Enačba (9) podaja številsko gostoto delcev  $n$  v odvisnosti od  $T$  in  $\mu$ . V praksi  $n$  pogosto poznamo, zanima pa nas povezava med temperaturo in kemijskim potencialom. Fazni prehod v Bose-Einsteinov kondenzat se zgodi pri kritični temperaturi  $T_c$ , pod katero je kemijski potencial  $\mu$  enak 0. Za kondenzirano stanje je namreč značilna makroskopska zasedenost osnovnega energijskega nivoja, kar na Sliki 3 ustreza krivulji z  $\mu = 0$ . Tedaj ima Bose-Einsteinova porazdelitev pol pri  $\epsilon = 0$ , kar z drugimi besedami pomeni divergenco zasedbenega števila.

V kritični točki lahko torej enačbo (9) z upoštevanjem  $T \rightarrow T_c$  in  $\mu \rightarrow 0$  prepišemo v

$$T_c = \frac{2\pi\hbar^2}{k_B m} \left(\frac{n}{2.612}\right)^{2/3}. \quad (12)$$

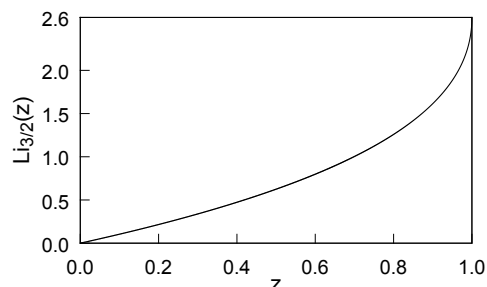
Z ohlajanjem plina bozonov pod  $T_c$  postane kemijski potencial torej enak 0, zasedenost osnovnega energijskega nivoja pa neskončna. Pravzaprav bi bila pravilnejša izjava, da izmed  $N$  delcev plina makroskopsko število delcev  $N_0$  zaseda osnovno energijsko stanje. Ne smemo namreč pozabiti, da smo tekom izpeljave predpostavili kontinuumsko limito  $V \rightarrow \infty$ , kar pomeni, da je tudi število vseh delcev sistema neskončno,  $N \rightarrow \infty$ . Izraz "makroskopsko" število delcev torej v resnici pomeni, da je razmerje  $N_0/N$  končno in nezanemarljivo.

Pod kritično temperaturo moramo pri zapisu gostote stanj makroskopsko zasedeno osnovno stanje obravnavati ločeno od preostalih. Z upoštevanjem  $\mu = 0$  prepišemo (8) v

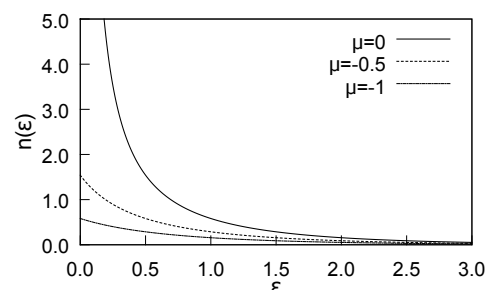
$$n = n_0 + \frac{(m)^{3/2}}{\sqrt{2}\pi^2\hbar^3} \int_0^{\infty} \frac{1}{e^{\beta\epsilon} - 1} \epsilon^{1/2} d\epsilon. \quad (13)$$

Z izračunom integrala nazadnje dobimo zvezo, ki povezuje temperaturo  $T$ , zasedenost osnovnega stanja  $n_0$  in zasedenost preostalih nivojev:

$$n = n_0 + 2.612 \left(\frac{mk_B T}{2\pi\hbar^2}\right)^{3/2}, \quad T \leq T_c. \quad (14)$$



Slika 2. Graf funkcije  $\text{Li}_{3/2}(z)$ .



Slika 3. Bose-Einsteinova porazdelitev za različne vrednosti  $\mu$ .

Enačbo (14) lahko z upoštevanjem enačbe (12) prepisemo v kompaktnjšo obliko:

$$\frac{n_0}{n} = 1 - \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2}. \quad (15)$$

Iz zadnje enačbe je jasno razvidno, da so pri  $T = 0$  vsi delci v osnovnem stanju, medtem ko pri višjih temperaturah njihov delež zvezno upada in končno doseže ničelno vrednost pri temperaturi faznega prehoda  $T_c$  (Slika 4).

S pomočjo zgornjih izrazov lahko sedaj izračunamo tudi preostale termodinamske količine, denimo povprečno notranjo energijo delca,  $u = \frac{U}{N}$ , pri čemer notranjo energijo sistema  $U$  izračunamo z integracijo po posameznih enodelčnih stanjih kot

$$U = V \int_0^{\infty} \frac{\epsilon}{e^{\beta(\epsilon-\mu)} - 1} g(\epsilon) d\epsilon. \quad (16)$$

V primeru  $T > T_c$  je povprečna notranja energija delca enaka

$$u = \frac{3}{2} k_B T \frac{\text{Li}_{5/2}\left(e^{\frac{\mu}{T}}\right)}{\text{Li}_{3/2}\left(e^{\frac{\mu}{T}}\right)}, \quad (17)$$

medtem ko pri  $T < T_c$  velja

$$u = \frac{3}{2} k_B \frac{T^{5/2} \text{Li}_{5/2}(1)}{T_c^{3/2} \text{Li}_{3/2}(1)}. \quad (18)$$

V limiti  $T \gg T_c$  velja  $u \approx \frac{3}{2} k_B T$ , kar ni nič drugega kot notranja energija delca enoatomnega idealnega plina. Pri visokih temperaturah je torej vpliv Bose-Einsteinove statistike na termodinamske količine zanemarljiv.

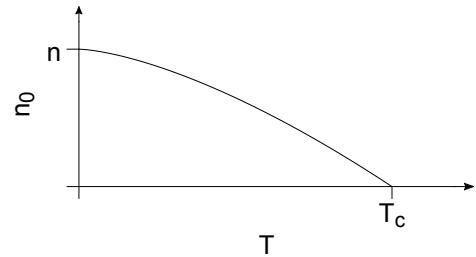
Fazni prehod lahko zaznamo z meritvijo ene izmed makroskopsko merljivih termodinamskih spremenljivk, denimo specifične toplote pri konstantni prostornini, ki je podana kot

$$C_V = \frac{\partial u}{\partial T}. \quad (19)$$

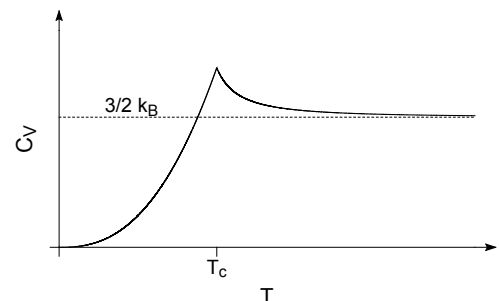
Za  $T \gg T_c$  velja  $C_V \approx \frac{3}{2} k_B$  kot za enoatomni idealni plin, za  $T < T_c$  pa dobimo:

$$C_V = \frac{15}{4} \frac{\text{Li}_{5/2}(1)}{\text{Li}_{3/2}(1)} \left(\frac{T}{T_c}\right)^{3/2} k_B. \quad (20)$$

Kot smo omenili, definira fazni prehod znatna sprememba termodinamskih lastnosti opazovanega sistema, kar pri Bose-Einsteinovi kondenzaciji predstavlja očiten skok odvoda, ki v odvisnosti  $C_V(T)$  nastopi pri temperaturi  $T = T_c$ . Pod slednjo koeksistira faza normalnih delcev plina z neničelnimi gibalnimi količinami ter kondenzat delcev z gibalno količino nič. Sam fazni prehod uvrščamo med fazne prehode drugega reda, za katere sistemu ni potrebno dodati latentne toplote.



Slika 4. Odvisnost števila delcev v najnižjem stanju  $n_0$  od temperature.



Slika 5. Temperaturna odvisnost specifične toplote  $C_V$  v okolici kritične temperature  $T_c$ .

### 2.1.1 Termična de Broglieva valovna dolžina

Za lažje razumevanje koncepta Bose-Einsteinove kondenzacije si na kratko oglejmo še pojem de Broglieve termične valovne dolžine. Slednjo lahko v grobem definiramo kot povprečno de Broglievo dolžino delcev idealnega plina pri dani temperaturi in je za sistem masivnih delcev, kakršnega obravnavamo, enaka

$$\Lambda = \frac{h}{\sqrt{3mk_B T}}. \quad (21)$$

Bose-Einsteinova kondenzacija nastopi pri kritični temperaturi  $T_c$ , ko postane  $\Lambda$  primerljiva z meddelčno razdaljo. Z nižanjem temperature  $\Lambda$  raste in postane pri  $T = 0$  v primerjavi z meddelčno razdaljo neskončna. Sistem delcev se takrat obnaša kot popolnoma koherenten val kar je značilnost čistega Bose-Einsteinovega kondenzata. Iz pogoja  $\Lambda_c \propto n^{-1/3}$  lahko do multiplikativne konstante natančno izpeljemo zvezo

$$T_c \propto \frac{n^{2/3}}{m},$$

ki je v skladu z enačbo (12).

### 2.2 Bose-Einsteinov kondenzat plina šibko interagirajočih delcev

V mnogih realnih sistemih meddelčnih interakcij ne moremo zanemariti oz. bi z obravnavno v okviru modela neinteragirajočih bozonov napovedali rezultate, ki bi znatno odstopali od eksperimentalnih opažanj, zato moramo postopati drugače. V tem poglavju bomo v okviru približka povprečnega polja izpeljali zvezo med kritično temperaturo in kemijskim potencialom za šibko interagirajoče delce.

Privzemimo, da imajo meddelčne interakcije mnogo krajši doseg od njihove medsebojne razdalje, kar za nenabite delce ponavadi dobro velja. Lahko torej pišemo

$$U(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2) \approx g\delta(\mathbf{r}_1 - \mathbf{r}_2), \quad (22)$$

kjer  $g$  predstavlja meddelčno interakcijo. V približku povprečnega polja obravnavamo meddelčne interakcije kot dodaten efektivni potencial:

$$U_{\text{eff}}(\mathbf{r}) = gn(\mathbf{r}). \quad (23)$$

Obnašanje delcev sedaj določa efektivna Schrödingerjeva enačba

$$\left( -\frac{\hbar^2}{2m} \nabla^2 + U_{\text{eff}}(\mathbf{r}) \right) \psi_k(\mathbf{r}) = \epsilon_k \psi_k(\mathbf{r}). \quad (24)$$

Enačba je nelinearna, saj v  $U_{\text{eff}}$  nastopa valovna funkcija preko zveze

$$n(\mathbf{r}) = \sum_{k=0}^{\infty} \frac{1}{e^{\beta(\epsilon_k - \mu)} - 1} |\psi_k(\mathbf{r})|^2. \quad (25)$$

Kemijski potencial  $\mu$  lahko določimo iz pogoja ohranitve celotnega števila delcev  $N$ , hkrati mora pri  $T = 0$ , ko so vsi delci v osnovnem stanju, veljati še:

$$n(\mathbf{r}) = N|\psi_0(\mathbf{r})|^2. \quad (26)$$

Sistem enačb (24)-(26) imenujemo enačbe **Gross-Pitaevskega** [6], podrobnosti reševanja katerih bomo tu pustili ob strani. Kar nas pravzaprav zanima, je namreč zveza med  $\mu$  in  $T$ . V približku povprečnega polja in z uporabo transformacije **Bogoljubova** [7], lahko izpeljemo:

$$\mu' = \mu - 2UVn. \quad (27)$$

Z drugimi besedami, v danem približku privede upoštevanje meddelčnih interakcij do renormalizacije kemijskega potenciala s povprečnim potencialom zaradi preostalih delcev, kjer velja  $UV = g$ , faktor 2 pa je posledica nerazločljivosti delcev in posledičnega izmenjalnega člena. Ko na levi strani enačbe (9) izrazimo  $n$  iz enačbe (27) in v eksponentu na desni strani upoštevamo zamenjavo  $\mu \rightarrow \mu'$ , pridemo do enačbe stanja za sistem interagirajočih delcev:

$$\mu - \mu' = \frac{2g}{\hbar^3} \left( \frac{mT}{2\pi} \right)^{3/2} \text{Li}_{3/2} \left( e^{\frac{\mu'}{T}} \right). \quad (28)$$

Kritično temperaturo  $T_c$  sedaj definira pogoj  $\mu' = 0$ , kar nas na koncu pripelje do zveze

$$\mu = \frac{2g}{\hbar^3} \left( \frac{mT_c}{2\pi} \right)^{3/2} \xi \left( \frac{3}{2} \right). \quad (29)$$

Za kemijski potencial v odvisnosti od temperature torej velja:

$$\mu \propto T_c^{3/2}. \quad (30)$$

Zveza (30) velja v nizkotemperaturni limiti. Dinamični eksponent  $\frac{3}{2}$  v odvisnosti  $\mu(T_c)$  je značilen za univerzalnostni razred prehoda v Bose-Einsteinov kondenzat.

### 3. Bose-Einsteinova kondenzacija magnonov

Sedaj se posvetimo Bose-Einsteinovi kondenzaciji v sistemih antiferomagnetno sklopljenih spinov oziroma kvantnih antiferomagnetih, v katerih predstavljajo osnovne vzbuditve bozonski kvazidelci, magnoni. Zahvaljujoč se preslikavi **Matsude** in **Matsubare** lahko kvantne antiferomagnete obravnavamo kot sistem bozonov s trdo sredico, pri čemer slednja pomeni močan odbojni potencial kratkega dosega. Kot bomo videli v nadaljevanju, je osnovno stanje dimera antiferomagnetno sklopljenih spinov spinski singlet, prvo vzbujeno stanje pa je tripletno. Preslikava slednjemu pripiše prisotnost triplona, bozonskega delca s spinom  $S = 1$ , medtem ko singlet opišemo z njegovo odsotnostjo. Na ta način lahko najnižja energijska stanja predstavimo s prisotnostjo oziroma odsotnostjo triplonov in tako namesto spinskega obravnavamo bozonski sistem, za kakršnega kvantna statistika napoveduje prehod v Bose-Einsteinov kondenzat. Ponuja se vprašanje, ali obstoj preslikave napoveduje možnost Bose-Einsteinovega kondenzata tudi v kvantnih antiferomagnetih. Kot bomo pokazali v nadaljevanju, je odgovor pritrdilen v primeru tistih antiferomagnetov, v katerih bližnji pari spinov  $S = 1/2$  tvorijo dimere antiferomagnetno sklopljenih spinov s singletnim osnovnim ter tripletnim vzbujenim stanjem.

#### 3.1 Izoliran dimer v magnetnem polju

Osnovno enoto omenjenih sistemov predstavlja izoliran dimer, par spinov  $S = 1/2$ , vezanih z antiferomagnetno izmenjalno interakcijo,  $J_0 > 0$ . V zunanem magnetnem polju zapišemo hamiltonko izoliranega dimera kot

$$\mathcal{H} = J_0 \mathbf{S}_1 \mathbf{S}_2 - g\mu_B B (\mathbf{S}_1 + \mathbf{S}_2) \mathbf{B}, \quad (31)$$

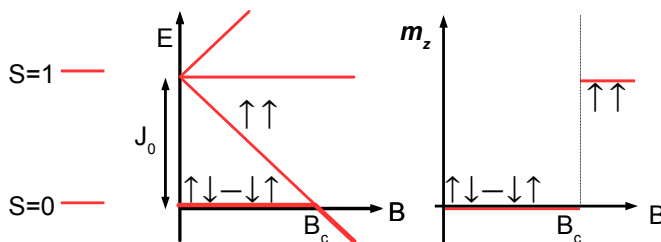
kjer  $g$  predstavlja Landéjevo giromagnetno razmerje,  $\mu_B$  je Bohrov magneton,  $\mathbf{B}$  pa gostoto zunanega magnetnega polja.

Lastne energije hamiltonke

so:

$$\begin{aligned} E_{\downarrow\downarrow} &= \frac{J_0}{4} + g\mu_B B, \\ E_{\uparrow\downarrow+\downarrow\uparrow} &= \frac{J_0}{4}, \\ E_{\uparrow\uparrow} &= \frac{J_0}{4} - g\mu_B B, \end{aligned} \quad (32)$$

$$E_{\uparrow\downarrow-\downarrow\uparrow} = -\frac{3J_0}{4}.$$



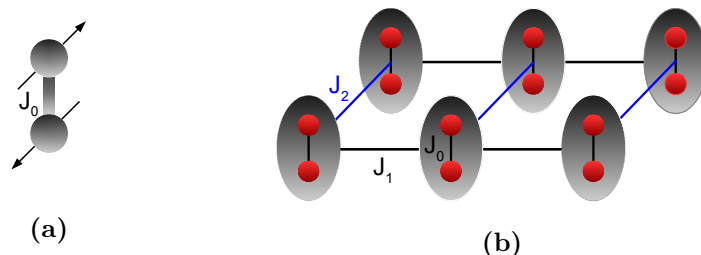
Slika 6. Energijski diagram osnovnega in prvega vzbujenega stanja izoliranega dimera v odvisnosti od  $B$  (levo) in magnetizacija osnovnega stanja (desno).

Osnovno stanje izoliranega dimera je spinski singlet s spinom  $S = 0$ , prvo vzbujeno stanje pa je triplet s spinom  $S = 1$ . V odsotnosti zunanjega magnetnega polja znaša energijska razlika med njima  $J_0$ , triplet pa je trojno degeneriran. V bozonski sliki ustreza tripletu prisotnost triplona, singletu pa njegova odsotnost.

Magnetno polje degeneracijo odpravi (Slika 6) in hkrati zniža vzbuditveno energijo triplona<sup>4</sup>, ki postane pri kritičnem polju  $B_c$  enaka nič. Osnovno stanje dimera tedaj postane tripletno, magnetizacija pa z ničelne skoči na maksimalno vrednost  $g\mu_B$ . Preslikavo med spini in bozoni bomo v nadaljevanju s pridom uporabljali in si jo velja zapomniti.

### 3.2 Dimeriziran kvantni antiferomagnet

Obravnavo lahko sedaj razširimo na sisteme sklopljenih dimerov. Do Bose-Einsteinove kondenzacije tipično pride v kristalni mreži dimerov, ki jih v večini preučevanih snovi sestavljajo pari bakrovih  $\text{Cu}^{2+}$  ionov s spini  $S = 1/2$ .



Slika 7. (a) Model izoliranega dimera. (b) Dvodimenzionalna mreža dimerov, kjer  $J_1, J_2$  označujeta meddimerne interakcije v različnih smereh.

Na kristalni mreži so poleg intradimerne interakcije  $J_0$  možne tudi meddimerne interakcije (Slika 7(b)), zato hamiltonko zapišemo kot

$$\mathcal{H} = \sum_i J_0 \mathbf{S}_{1,i} \mathbf{S}_{2,i} + \sum_{\langle ijmn \rangle} \mathbf{J}_{mij} \mathbf{S}_{m,i} \mathbf{S}_{n,j} - g\mu_B \mathbf{B} \sum_{\langle ni \rangle} S_{n,i}^z. \quad (33)$$

Indeksa  $i, j$  označujeta mesta dimerov,  $m, n = 1, 2$  pa mesti ionov znotraj posameznih dimerov. Zapis  $\langle \dots \rangle$  standardno pomeni seštevanje po najbližjih sosedih. V nadaljevanju bomo upoštevali, da

<sup>4</sup>V nadaljevanju bomo s prisotnostjo triplona označevali stanje  $|\uparrow\uparrow\rangle$ . Prvotni 4-dimenzionalni Hilbertov prostor smo zožali na njegov dvodimenzionalni podprostor, saj preostali stanji tripleta za razlago Bose-Einsteinove kondenzacije nista zanimivi.

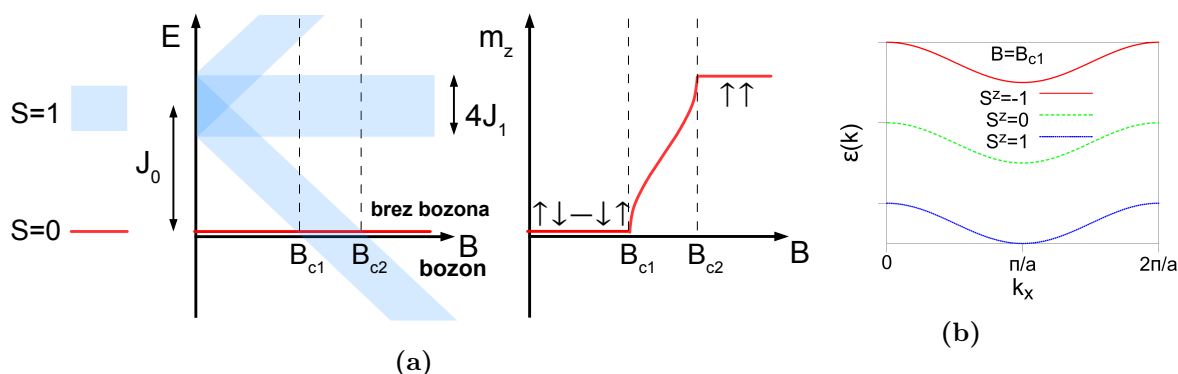


so v opazovanih sistemih meddimerne interakcije, ki jih predstavlja drugi člen v hamiltonki, mnogo šibkejši od  $J_0$ . Osnovno stanje sistema je v odsotnosti zunanega magnetnega polja zato še zmeraj singletno, kot v izoliranem dimeru, in je pri nizkih temperaturah magnetno neurejeno.

Zaradi omenjenih meddimernih interakcij osnovne vzбудitve, ki jih ponovno opišemo s prisotnostjo triplonov, niso več vezane na posamezne dimere, temveč lahko med njimi preskakujejo. Drugi člen v hamiltonki tako prepoznamo kot "skakalni člen", ki predstavlja kinetično energijo triplonov. V kvadratni mreži jo za projekcije spina  $S^z = 0, \pm 1$  v prvem redu  $J_1$  podaja disperzijska relacija

$$\epsilon(\mathbf{k}) = J_0 + J_1[\cos k_x a + \cos k_y a] - g\mu_B B S^z, \quad (34)$$

kjer je  $\mathbf{k} = (k_x, k_y)$  valovni vektor triplona,  $a$  pa mrežna konstanta. Kvadratno mrežo smo brez izgube splošnosti opisa izbrali zaradi enostavnosti obravnave. Energijski diagram najnižjih stanj sistema in magnetizacija v odvisnosti od zunanega magnetnega polja sta prikazana na Sliki 8(a), disperzija v okolici kritične točke  $B_{c1}$  pa na sliki 8(b).



**Slika 8.** (a) Levi graf prikazuje odvisnost energije štirih energijsko najnižjih stanj sistema od zunanega magnetnega polja  $B$ .  $J_0$  predstavlja energijsko režo med osnovnim in prvim vzbuđenim stanjem pri  $B = 0$ ,  $J_1$  pa širino energijskega pasu kot posledico meddimerskih interakcij. Na desnem grafu je prikazana odvisnost magnetizacije od magnetnega polja.  $B_{c1}$  in  $B_{c2}$  označujeta kritični magnetni polji. V vmesnem območju lahko govorimo o Bose-Einsteinovi kondenzaciji triplonov. (b) Disperzijska relacija (34) pri kritičnem polju  $B_{c1}$ . Vidimo, da jo lahko za najnižji pas okoli minimuma  $k_{x0} = \pi/a$  razvijemo kvadratično kot  $\epsilon = \frac{J_1 a^2}{2} k^2$ . V okolici kritične točke lahko torej triplone obravnavamo kot plin prostih delcev z efektivno maso  $m_{\text{eff}} = \hbar^2 / J_1^2 a^2$ .

Zaradi meddimernih interakcij v energijskem diagramu nimamo več črt kot pri izoliranem dimeru, temveč pasove s širino  $4J_1$ . Dokler obstaja pri ničelni temperaturi med osnovnim in prvim vzbuđenim stanjem energijska reža, ki znaša pri ničelnem magnetnem polju  $J_0 - 2J_1$ , je osnovno stanje magnetno neurejeno in v njem ni triplonov, tako kot v izoliranem dimeru. Za razliko od slednjega, pa sta kritični polji sedaj dve. Ko magnetno polje doseže vrednost  $B_{c1}$ , energijska reža izgine in v osnovnem stanju se pojavijo prvi triploni. Hkrati z njihovim številom raste z večanjem magnetnega polja tudi magnetizacija osnovnega stanja. Nad  $B_{c2}$  je z enim triplonom na dimer dosežena maksimalna zasedenost osnovnega stanja, posledično pa se zasiči tudi magnetizacija. Ker makroskopsko število triplonov pod vplivom magnetnega polja zasede osnovno stanje, lahko pojav interpretiramo kot Bose-Einsteinovo kondenzacijo, magnetnemu polju pa pripišemo vlogo kemijskega potenciala, s čimer se bomo podrobneje seznanili v naslednjem poglavju.

### 3.3 Bose-Einsteinova kondenzacija triplonov

Za obravnavo Bose-Einsteinove kondenzacije je prikladnejši zapis hamiltonke (33) v drugi kvantizirani obliki prek operatorjev  $a_i^\dagger$  in  $a_i$ , ki na  $i$ -tem dimeru kreirata oziroma anihilirata bozon. Prepis

nam dovoljuje dejstvo, da spinski operatorji, ki delujejo na različnih dimerih, komutirajo, in tako zadoščajo enakim komutacijskim relacijam kot omenjena bozonska operatorja, hamiltonka pa se zapiše kot

$$\mathcal{H} = \sum_i (J_0 - g\mu_B B) a_i^\dagger a_i + \sum_{i,j} t_{ij} a_i^\dagger a_j + \frac{1}{2} \sum_{i,j} U_{ij} a_i^\dagger a_j^\dagger a_j a_i, \quad (35)$$

kjer prvi člen predstavlja energijo, potrebno za nastanek mirujočega triplona na  $i$ -tem dimeru. Ta znaša  $(J_0 - g\mu_B B)$ , ki ji tako lahko pripišemo vlogo kemijskega potenciala oziroma:

$$\mu = J_0 - g\mu_B B. \quad (36)$$

Drugi člen je posledica skakanja triplonov med dimeri,  $t_{ij}$  zato predstavlja njihovo kinetično energijo, medtem ko tretji člen predstavlja močno odbojno interakcijo med bližnjimi triploni in je posledica enostavnega fizikalnega dejstva, da lahko iz enega para spinov  $S = 1/2$  sestavimo samo eno tripletno stanje, kar v bozonski sliki pomeni, da lahko posamezen dimer naenkrat zaseda kvečjemu en triplon. Ker sama statistika bozonom ne preprečuje večkratne zasedenosti istega stanja, moramo omejitev upoštevati z uvedbo močnega odbojnega potenciala kratkega dosega.

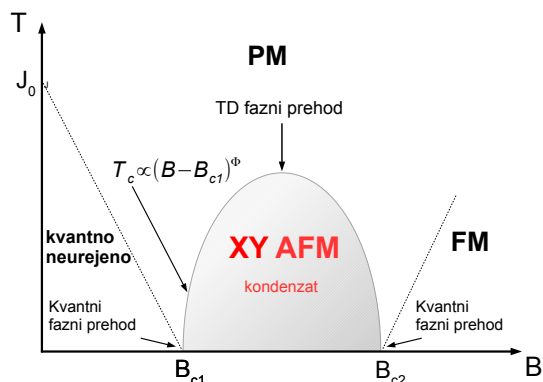
V splošnem zahteven problem se v okolici kritične točke pri  $T = 0$  in  $B = B_{c1}$  poenostavi na primer hamiltonke šibko interagirajočih bozonov, saj je kinetična energija triplonov okrog minimuma kvadratična, v osnovnem stanju pa jih je malo in le redko medsebojno interagirajo, zato lahko interakcije opišemo z delta funkcijami in pri obravnavi uporabimo rezultate podpoglavja 2.2

Za odvisnost kritične temperature od magnetnega polja tako dobimo<sup>5</sup>

$$T_c \propto (B - B_{c1})^{2/3}, \quad (37)$$

kjer smo v (36) upoštevali, da je pri kritičnem polju  $\mu = 0$ . Fazni diagram odvisnosti  $T_c(B)$  je prikazan na Sliki 9. Levo od kritične točke v osnovnem stanju ni magnetne ureditve. Prehodu triplonov v koherentno kondenzirano stanje ustreza v spinski sliki pojav antiferomagnetne ureditve v ravnini  $xy$ , pravokotni na zunanje magnetno polje, številu vseh kondenziranih triplonov pa celotna magnetizacija v smeri  $z$ . Značilno “kupolasto” obliko odvisnosti kritične temperature od magnetnega polja podaja v bližini kvantne kritične točke odvisnost (37). Širina energijske reže  $J_0$  določa sredino “kupole”, meddimerne interakcije pa določajo njeno višino oziroma temperaturno obstojnost kondenzata.

Poleg naštetih analogij med triploni v antiferomagnetu in bozoni v Bosejevem plinu hladnih atomov obstajajo med sistemoma tudi nekatere pomembne razlike, ki jih bomo tu samo našteali. Najpomembnejša je posledica dejstva, da se pri plinu atomov njihovo število ohranja (mikrokanonična obravnava), medtem ko število triplonov v osnovnem stanju nadzorujemo s kemijskim potencialom, kar terja veleanonično obravnavo. Tipično imajo triploni manjšo efektivno maso od hladnih atomov, zato je Bose-Einsteinov kondenzat triplonov obstojen tudi pri temperaturah nekaj kelvinov, medtem ko pri hladnih atomih običajno govorimo o nanokelvinih.



**Slika 9.** Fazni diagram  $T(B)$  s kvantno neurejeno, paramagnetno (PM), feromagnetno (FM) in XY urejeno antiferomagnetno kondenzirano fazo, ki predstavlja Bose-Einsteinov kondenzat.

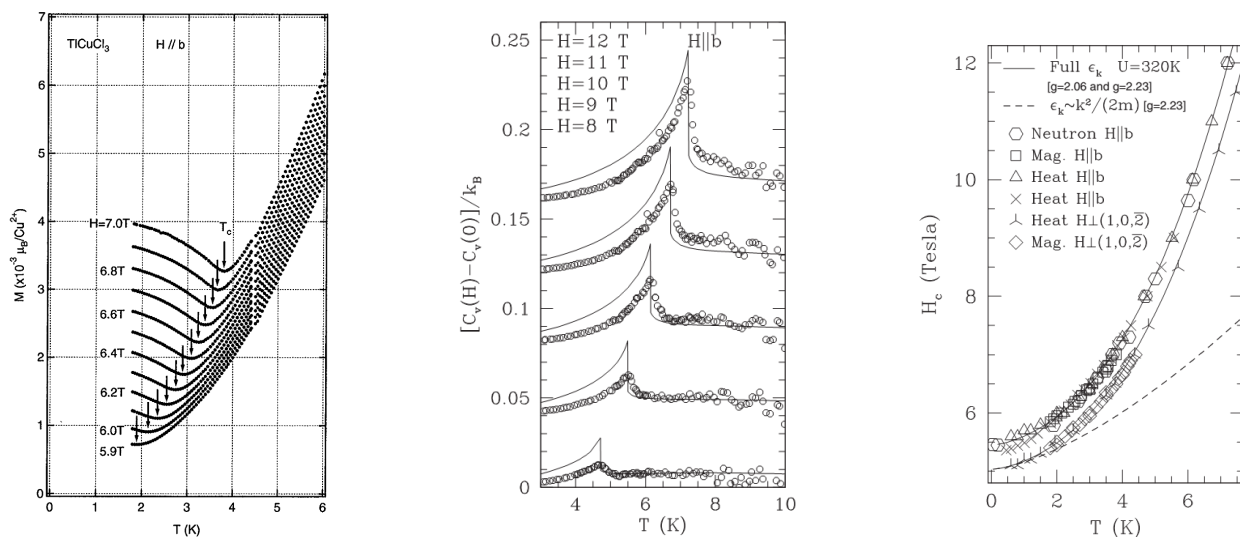
<sup>5</sup>Po analogiji z elektroni in vrzelmi v polprevodniku lahko podobno poenostavitev naredimo tudi v okolici druge kritične točke pri  $B_{c2}$ , kjer nato izpeljemo zvezo  $T_c \propto (B_{c2} - B)^{2/3}$ .

### 3.4 Meritve

Za preučevanje modela Bose-Einsteinove kondenzacije magnonov so na voljo številne eksperimentalne tehnike, ki jih v grobem delimo v dve skupini. V prvo uvrščamo makroskopske metode, pri katerih na prisotnost pojava sklepamo iz značilnosti temperaturnih odvisnosti makroskopsko merljivih termodinamskih količin. Sem spadajo denimo meritvi temperaturne odvisnosti magnetizacije in specifične toplote v okolici kritične točke ter primerjava kritičnega eksponenta v potenčni odvisnosti  $T_c(B)$  s teoretično napovedjo (37). Drugo skupino predstavljajo lokalne metode, pri katerih z uporabo nevtronskega elastičnega ali neelastičnega sipanja ter jedrske in elektronske spinske resonance preučujemo lokalna magnetna polja v vzorcih in na podlagi meritev sklepamo o lastnostih interakcij v snovi.

#### 3.4.1 Makroskopske meritve

Eno prvih potrditev modela Bose-Einsteinove kondenzacije magnonov je dala meritev temperaturne odvisnosti magnetizacije pri različnih magnetnih poljih v vzorcu  $\text{TlCuCl}_3$  [4]. Eksperimentalni podatki potrjujejo napoved značilnega minimuma magnetizacije pri  $T_c$ .



(a) Meritev temperaturne odvisnosti magnetizacije  $M(T)$  v  $\text{TlCuCl}_3$  pri različnih gostotah magnetnega polja [4].

(b) Temperaturna odvisnost specifične toplote na dimer v  $\text{TlCuCl}_3$  pri različnih gostotah magnetnega polja [7].

(c) Eksperimentalno izmerjena in teoretično napovedana odvisnost  $H_c(T)$  v  $\text{TlCuCl}_3$  za različne eksperimentalne tehnike [7].

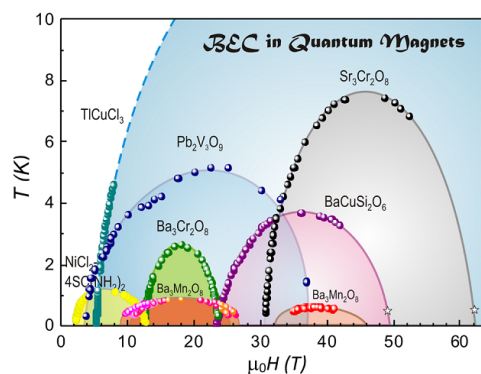
**Slika 10.** (a) Minimum v odvisnosti  $M(T)$  pri  $T = T_c$  uspešno razloži teorija Bose-Einsteinove kondenzacije triplonov [4], medtem ko model povprečnega polja pod  $T_c$  nepravilno napoveduje monotono padanje magnetizacije. (b) Meritev temperaturne odvisnosti specifične toplote (točke) v okolici  $T_c$  pri različnih gostotah magnetnega polja (zaradi jasnosti so grafi vertikalno zamaknjeni) in njihova primerjava s teoretičnim modelom (črte) [7]. Eksperimentalni podatki potrjujejo teoretično napovedan vrh v obliki črke  $\lambda$ , ki pa je v praksi nekoliko nižji od napovedi. (c) Rezultati meritev odvisnosti  $H_c(T)$  z različnimi eksperimentalnimi tehnikami ter prilagojene krivulje.

Drugo pomembno eksperimentalno tehniko predstavlja določanje eksponenta<sup>6</sup> $\phi$  v modelu  $T_c \propto (B - B_{c1})^\phi$ . Ta dobro opiše meritve na Sliki 10(c), vendar z eksponenti med 0.45 in 0.60, kar je manj od napovedanega rezultata 2/3. Razlogi odstopanja presegajo okvire članka in jih ne bomo posebej obravnavali. Z grafa vidimo, da model s privzeto kvadratično disperzijsko relacijo, kakršno smo privzeli tudi sami, meritvam dobro ustreza pri nizkih temperaturah, kar upravičuje našo poenostavljeno obravnavo. Preostali dve krivulji upoštevata realistično disperzijo, pridobljeno na podlagi nevtronskega sipanja, in dve različni vrednosti faktorja  $g$ .

Slika 11 prikazuje fazne diagrame različnih antiferomagnetov, v katerih pride do kondenzacije. Velikost kritičnega magnetnega polja določa jakost intradimerne interakcije, medtem ko je širina značilne “kupole” odvisna od meddimer-skih interakcij, ki, kot naj spomnimo, določajo širino energijskih pasov v prvem vzbujenem stanju. Izmerjene potenčne odvisnosti nekoliko odstopajo od napovedanega faktorja 2/3, pri izpeljavi smo namreč obravnavali idealiziran model meddimernih interakcij.

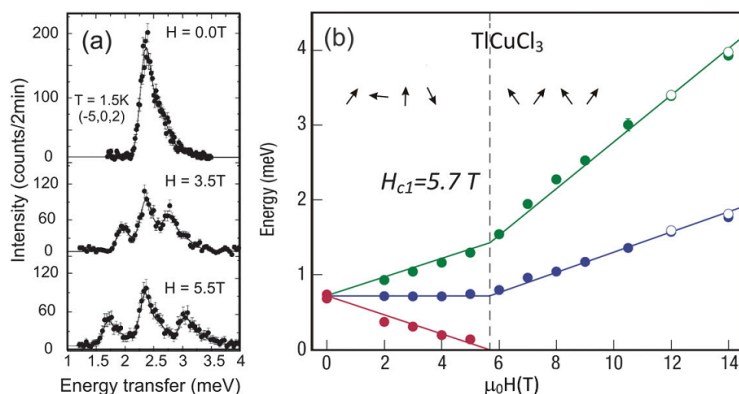
### 3.4.2 Lokalne meritve

Z lokalnimi tehnikami lahko prek sklopitve sipanih delcev z lokalnimi magnetnimi polji v vzorcu preučujemo naravo in jakost interakcij v njem. Primer tovrstne tehnike je meritev zeemanskega razcepa v  $\text{TlCuCl}_3$  z uporabo neelastičnega nevtronskega sipanja (Slika 12). V zunanjem magnetnem polju se enojni sipalni vrh razcepi na tri vrhove, kar kaže na obstoj treh spinskih nivojev z različnimi energijami. Meritve pri več različnih gostotah magnetnega polja potrjujejo, da postane singletno stanje pri kritični gostoti magnetnega polja degenerirano z osnovnim singletnim stanjem, kar smo v članku navedli kot enega izmed pogojev za nastop Bose-Einsteinove kondenzacije triplonov.



**Slika 11.**  $T_c(H)$  odvisnost za široko družino kvantnih antiferomagnetov, v katerih pride do Bose-Einsteinove kondenzacije magnonov. Za vse fazne diagrame je značilna “kupolasta” oblika, znotraj katere pride do antiferomagnetne ureditve v ravnini  $xy$ . Opazimo, da so pri večjih poljih meritve redke, kar je enostavno posledica dejstva, da lahko tako močna polja dosežemo zgolj s pulznimi magneti, s katerimi lahko zaradi močnih tokov izvedemo samo po eno meritev [1].

<sup>6</sup>V splošnem velja  $\phi = z/d$ , kjer je  $d$  dimenzionalnost sistema,  $z$  pa dinamični kritični eksponent, definiran z zvezo  $\epsilon \propto k^z$ . Rezultat (37) tako v resnici sledi iz privzete kvadratične disperzijske relacije in tridimenzionalnega sistema.



**Slika 12.** Analiza energijskih nivojev v  $\text{TlCuCl}_3$  z neelastičnim nevtronskim sipanjem. (a) Intenziteta v odvisnosti od prenosa energije pri različnih gostotah magnetnega polja. Vrh pri  $B = 0$  magnetno polje razcepi, kar kaže na prisotnost treh spinskih nivojev z različnimi energijami. (b) Spinski energijski nivoji kot funkcija gostote zunanje magnetnega polja. Kritično polje znaša  $B_{c1} = 5.7 \text{ T}$ . Povzeto po [1].

#### 4. Zaključek

Z uporabo preslikave med bozoni in spini lahko načela Bose-Einsteinove kondenzacije plina interagirajočih bozonov razširimo na primer magnetnih sistemov, v katerih kondenzirajo bozonski kvazidelci, triploni.

Preplet lastnosti kristalne mreže in močnih medbozonskih interakcij v kvantnih antiferomagnetih omogoča obravnavo pojava v okvirih, ki daleč presegajo osnovna načela Bose-Einsteinove kondenzacije, predstavljena v tem članku. Kondenzate v magnetnih sistemih odlikuje visoka temperaturna obstojnost, uporaba magnetnega polja in spektrografskih metod pa omogočata podrobno preučevanje fizikalnih lastnosti v okolici kvantne kritične točke. Ker lahko gostoto bozonov nadzorujemo z magnetnim poljem, predstavljajo idealen model za preučevanje sistemov, v katerih gostoto delcev nadzorujemo s kemijskim potencialom. Veliko število možnih kristalnih geometrij in dimenzionalnosti v povezavi s širokim naborom eksperimentalnih orodij za preučevanje spinov omogočata obravnavo dokaj eksotičnih sistemov močno interagirajočih kvantnih delcev, kot npr. Luttingerjevih tekočin.

#### Zahvala

Za pomoč in nasvete pri pisanju bi se rad zahvalil mentorju dr. Martinu Klanjšku.

#### LITERATURA

- [1] V. Zapf, M. Jaime in C. Batista, *Bose-Einstein condensation in quantum magnets*, *Reviews of Modern Physics* **86**, 563 (2014).
- [2] *Wikipedia - Bose-Einsteinov kondenzat*, [ogled 15.5.2015], dostopno na: [http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bose\\_Einstein\\_condensate.png](http://commons.wikimedia.org/wiki/File:Bose_Einstein_condensate.png)
- [3] T. Giamarchi, C. Rüegg in O. Tchernyshyov, *Bose-Einstein condensation in magnetic insulators*, *Nature Physics* **4**, 198 (2008).
- [4] T. Nikuni, M. Oshikawa, A. Oosawa, in H. Tanaka, *Bose-Einstein Condensation of Dilute Magnons in  $\text{TlCuCl}_3$* , *Phys. Rev. Lett.* **84**, 5868 (2000).
- [5] I. Kuščer in S. Žumer, *Toplota, DMFA - založništvo*, Ljubljana, (2006).
- [6] J. Annett, *Superconductivity, superfluids, and condensates*, Oxford: Oxford University Press, (2004).
- [7] G. Misguich in M. Oshikawa, *Bose-Einstein Condensation of Magnons in  $\text{TlCuCl}_3$ : Phase Diagram and Specific Heat from a Self-consistent Hartree-Fock Calculation with a Realistic Dispersion Relation*, *Journal of the Physical Society of Japan* **73**, 3429 (2004).