



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ
ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТМАН ЗА ФИЗИКУ



**Утицај спинске анизотропије и Ђалошински-
Морија интеракције на магнетне особине
двoдимензионалног фрустрираног Хајзенберговог
антиферомагнета са спином $S=1/2$**

- мастер рад -

Ментор: др Милица Рутоњски

Кандидат: Денис Мујo

Нови Сад, 2023.

Садржај

Увод	5
1 Уводна теоријска разматрања	7
1.1 Хајзенбергов модел	7
1.2 Грине функције	11
2 Магнетна својства дводимензионалног Хајзенберговог антифероманета са Ђалошински-Морија интеракцијом у оквиру методе Гриневих функција	17
2.1 Моделни хамилтонијан	17
2.2 Одређивање спектра елементарних ексцитација	26
2.3 Магнетизација и температура фазног прелаза	39
3 Анализа резултата добијених за спектар елементарних ексцитација и магнетизације	48
3.1 Анализа резултата за спектар елементарних ексцитација	48
3.2 Анализа резултата за магнетизацију	57
3.3 Анализа резултата за Нелову температуру	64
4 Примена резултата на родитељско једињење високотемпературских суперпроводника La_2CuO_4	68
4.1 Структура La_2CuO_4	68
4.2 Анализа резултата и поређење са експерименталним подацима	71

5	Закључак	74
A	Прилог	76
	Литература	78

Увод

У овом мастер раду биће анализиран дводимензионални антиферромагнетни фрустрирани анизотропни Хајзенбергов модел са Ђалошински-Морија интеракцијом методом двовременских температурских Гринових функција у оквиру тјабликовске апроксимације. За овај модел одредимо спектар елементарних екситација, магнетизацију и температуру на којој се дешава фазни прелаз. Значај самог модела је у томе што се може искористити за групу једињења која прелазе у суперпроводно стање на релативно високим температурама (нпр. за керамички оксид бакра и лантана La_2CuO_4 допиран баријумом, температура преласка у суперпроводно стање износи $T \approx 30\text{K}$). Ова једињења позната су као високотемпературски суперпроводици [1]. Магнетне решетке ових једињења могу се са задовољавајућом тачношћу апроксимирати дводимензионалним моделом, с обзиром да је интеракција спинова у равни много већа од међураванске интеракције. Ако бисмо узели у обзир све интеракције између спинова у равни, то би веома закомпликовало анализу модела и зато се уводи апроксимација где посматрамо само интеракције између првих и других најближих суседа. С обзиром да су посматране интеракције антиферромагнетне долази до фрустрације. Спонтана магнетизација за овај модел последица је постојања спинске анизотропије и Ђалошински-Морија интеракције захваљујући којој су спинови закрнути за мали угао ван равни што доводи до тога да поред антиферромагнетног постоји и слабо ферромагнетно уређење.

Као што је речено, метода која се користи за одређивање величина као што су спектар елементарних екситација, магнетизација и критична температура је метода двовременских температурских Гринових функција. Метода Гринових функција има веома широку примену у физици. На пример, у квантној статистичкој физици користи се за опис неравнотежних средњих вредности и одзива система на спољашњу пертурбацију. У теорији кондензоване материје ова метода је веома добра за описивање комплексних интерагујућих система. Помоћу ње могу се добити спектар елементарних екситација система, његова магнетизација, критична температура, суцептибилност и друге величине. Још једна предност Гринових функција је у томе што дају задовољавајуће слагање са експерименталним подацима у широком температурском интервалу.

Мастер рад је конципиран на следећи начин: У првој глави дате су уводне поставке о Хајзенберговом моделу и Гриновим функцијама. Описана је дводимензионална магнетна решетка у Хајзенберговом моделу, односно, дат је одговарајући хамилтонијан у антиферромагнетном случају. Затим је дата дефиниција Гринових функција и показано је како се одређују једначине кретања Гринове функције. Дата је такође дефиниција корелационе функције која је потребна за израчунавање магнетизације. Уједно је приказано и тјабликовско декупловање Гринових

функција.

У другој глави је најпре дат опис модела који користимо, односно дводимензионални анизотропни фрустрирани Хајзенбергов антиферомагнет са Ђалошински-Морија интеракцијом. Затим су изведени експлицитни изрази за спектар елементарних ексцитација, магнетизацију и температуру фазног прелаза.

У трећој глави је на основу добијених израза извршена детаљна анализа зависности израчунатих величина од фрустрације, спинске анизотропије и Ђалошински-Морија интеракције. Уједно је објашњено шта се из тих зависности може закључити у вези са понашањем модела.

Да бисмо испитали применљивост овог модела упоредићемо резултате које он даје са доступним експерименталним резултатима, што је урађено у четвртој глави. Једињење које ћемо искористити је родитељско једињење високотемпературских суперпроводника La_2CuO_4 који већ деценијама заокупља пажњу физичара који се баве теоријском физиком кондензованог стања материје, на коме су спроведена бројна мерења и за који у литератури постоје бројни експериментални подаци.

Добијени закључци сажето су наведени у петој глави.

На крају, у прилогу А, дате су неке опште напомене о првој Брилуеновој зони, директној и инверзној решетки и представљен је начин преласка са суме на интеграл, што је потребно приликом нумеричке интеграције спектра елементарних побуђења и магнетизације.

1 Уводна теоријска разматрања

1.1 Хајзенбергов модел

Један од модела којим се често описују магнетна својства система локализованих спинова, а који ће бити коришћен и у овом раду, јесте Хајзенбергов модел код којег у чворове решетке постављамо спинове које посматрамо као операторе. У складу са тим, посматрајмо кристалну решетку са N чворова са спинским оператором $\hat{\mathbf{S}}_i$ на i -том чвору [2, 3]. Одговарајући хамилтонијан је дефинисан као

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\substack{i,j \\ i \neq j}} J_{ij} \hat{\mathbf{S}}_i \cdot \hat{\mathbf{S}}_j. \quad (1.1)$$

У изразу (1.2) J_{ij} је интеракција измене између спинова на чворовима i и j . Фактор $\frac{1}{2}$ је убачен да би се избегло двоструко бројање спинова. За $J_{ij} < 0$ имамо феромагнетно, а за $J_{ij} > 0$ антиферомагнетно уређење спинова. За операторе $\hat{\mathbf{S}}_i$ и $\hat{\mathbf{S}}_j$, са компонентама $\hat{S}_{i/j}^x, \hat{S}_{i/j}^y, \hat{S}_{i/j}^z$, важе комутационе релације

$$\begin{aligned} [\hat{S}_i^x, \hat{S}_j^y] &= i\hbar \hat{S}_i^z \delta_{ij}, \\ [\hat{S}_i^y, \hat{S}_j^z] &= i\hbar \hat{S}_i^x \delta_{ij}, \\ [\hat{S}_i^z, \hat{S}_j^x] &= i\hbar \hat{S}_i^y \delta_{ij}, \end{aligned} \quad (1.2)$$

или сажетије

$$[\hat{S}_i^a, \hat{S}_j^b] = i\hbar \sum_c \varepsilon_{abc} \hat{S}_i^c \delta_{ij}, \quad (1.3)$$

где је ε_{abc} Леви-Чивита симбол дефинисан као

$$\varepsilon_{abc} = \begin{cases} +1, & \text{ако је } abc \text{ парна пермутација } x, y \text{ и } z, \\ -1, & \text{ако је } abc \text{ непарна пермутација } x, y \text{ и } z, \\ 0, & \text{у осталим случајевима.} \end{cases} \quad (1.4)$$

Често уместо $\hat{S}_j^a$ ($a = x, y, z$) користимо операторе $\hat{S}_j^+$ и $\hat{S}_j^-$ дефинисане као

$$\hat{S}_j^\pm = \hat{S}_j^x \pm i\hat{S}_j^y. \quad (1.5)$$

Комутационе релације за ове операторе су

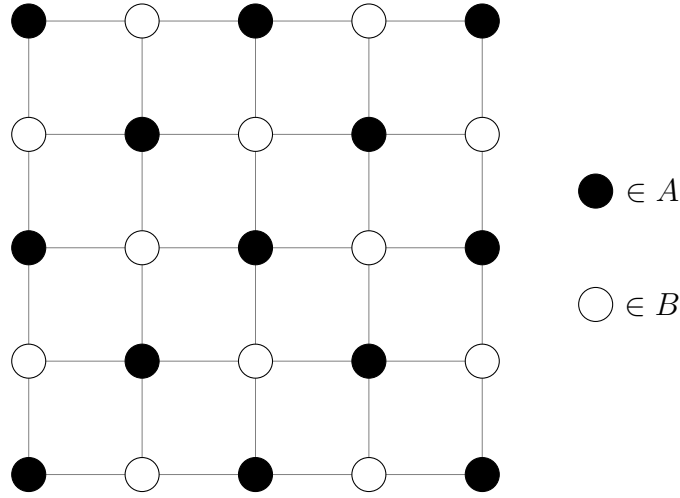
$$\begin{aligned} [\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] &= 2\hbar \hat{S}_i^z \delta_{ij}, \\ [\hat{S}_i^z, \hat{S}_j^\pm] &= \pm \hbar \hat{S}_i^\pm \delta_{ij}. \end{aligned} \quad (1.6)$$

Хамилтонијан (1.1) изражен помоћу оператора $\hat{S}^\pm$ гласи

$$\hat{H} = \sum_{i,j} J_{ij} \left(\frac{\hat{S}_i^+ \hat{S}_j^- + \hat{S}_i^- \hat{S}_j^+}{2} + \hat{S}_i^z \hat{S}_j^z \right). \quad (1.7)$$

Ако посматрамо антиферромагнетни модел, тј. хамилтонијан (1.7) за $J_{ij} > 0$, магнетну решетку, као што је приказано са Слици 1.1, чине две подрешетке, A и B , са антипаралелним спиновима (ради једноставности, на Слици 1.1 представљена је дводимензионална решетка). Посматрамо стање у којем је поларизација максимална, то јест, имамо спинове усмерене ка горе (са $m = S$) и спинове усмерене ка доле ($m = -S$). Ово стање је Нелово стање $|\Psi\rangle$ које је дато као

$$|\Psi\rangle = \prod_{i \in A} \prod_{j \in B} |S\rangle_i | - S\rangle_j. \quad (1.8)$$



Слика 1.1: Антиферромагнетна фаза. Подрешетку A чине спинови са $m = S$, а подрешетку B са $m = -S$.

У (1.8) смо игнорисали ознаку за спин S и узели у обзир само ознаку за $m = S$ и $m = -S$, односно $|S, m\rangle \equiv |m\rangle$. Када делујемо хамилтонијаном (1.7) на Нелово стање (1.8), добијамо

$$\begin{aligned}
 H|\Psi\rangle &= \sum_{i,j} J_{ij} \left(\frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- |\Psi\rangle + S_i^- S_j^+ |\Psi\rangle) + S_i^z S_j^z |\Psi\rangle \right) \\
 &= \sum_{i,j} J_{ij} \left(\frac{1}{2} ([S(S+1) - S(S-1)] \dots |S-1\rangle_i \dots | -S+1\rangle_j) - S^2 |\Psi\rangle \right).
 \end{aligned} \tag{1.9}$$

Примећујемо да Нелово стање није својствено стање квантног хамилтонијана. Основно стање $|\Psi\rangle$ антиферомангнета је синглет укупног спина $S_{tot}|\Psi\rangle = 0$ ($S_{tot} = \sum_k S_k$). Ово је детаљније описано у [4]. У хамилтонијану (1.1), као што је речено, J_{ij} представља интеракцију измене између спинова на чворовима i и j . У зависности од природе интеракције, у систему може доћи до фрустрације. Фрустрација се јавља када један спин (или више спинова) не може наћи оријентацију у којој су потпуно задовољене све интеракције тог спина са својим суседима [4, 5].

Најзад, модел који ћемо посматрати у овом раду, тј. дводимензионални фрустрирани Хајзенбергов модел са анизотропијом и Ђаловински-Морија интеракцијом, трпи класични фазни прелаз друге врсте, али у раду ће бити разматран и квантни фазни прелаз до којег долази

мењањем параметра фрустрације. Под фазним прелазом се подразумева прелаз система из једне фазе у другу при чему долази до промене одређених величина система. Фазне прелазе можемо поделити на фазне прелазе првог и другог реда (дисконтинуалне и континуалне, респективно). Фазе система можемо описати параметром уређености који је изабран тако да је различит од нуле само у уређеној фази [6]. Као пример може се узети прелаз парамагнет-антиферомагнет (фазни прелаз другог реда). Параметар уређености је тада спонтана магнетизација σ .

1.2 Гринове функције

Једна од најчешће коришћених метода за одређивање енергије елементарних екситација и магнетизације у широком температурском интервалу (од апсолутне нуле до температуре фазног прелаза) јесте метода Гринових функција (ГФ)[7]. Гринава функција се дефинише као

$$G(x - x', t - t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle = \theta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')] \rangle. \quad (1.10)$$

У (1.10) $\hat{\mathcal{A}}(x, t)$ и $\hat{\mathcal{B}}(x', t')$ представљају операторе који зависе од просторних (x, x') и временских (t, t') координата, $\theta(t - t')$ је Хевисајдова степ функција

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 1, & t > t' \\ 0, & t \leq t' \end{cases}, \quad (1.11)$$

$\langle \dots \rangle$ представља средњу вредност по канонском ансамблу која је дефинисана као $\langle \dots \rangle = Z^{-1} \text{Tr} \left(\dots e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} \right)$ (где је $Z = \text{Tr} \left(e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} \right)$ статистичка сума, $\hat{H}$ је хамилтонијан система, T је температура система, а k_B је Болцманова константа), док је $[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]$ комутатор дефинисан као $[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')] = \hat{\mathcal{A}}(x, t)\hat{\mathcal{B}}(x', t') - \hat{\mathcal{B}}(x', t')\hat{\mathcal{A}}(x, t)$. На основу (1.10) видимо да Гринава функција зависи од *разлике* просторних $x - x'$ и временских $t - t'$ координата. Наиме, ако посматрамо просторно хомогену средину, онда Гринава функција не зависи од просторних координата x и x' појединачно, већ само од њихове разлике. Овде се мора водити рачуна о томе да средина буде просторно довољно велика да бисмо могли да занемаримо утицај граница средине (у супротном, ГФ зависи од x и x' појединачно јер на границама средине важе другачији услови него у унутрашњости). С обзиром да су оператори $\hat{\mathcal{A}}(x, t)$ и $\hat{\mathcal{B}}(x', t')$ дати у такозваној Хајзенберговој слици, односно,

$$\begin{aligned} \hat{\mathcal{A}}(x, t) &= e^{i\hat{H}t} \hat{A}(x) e^{-i\hat{H}t}, \\ \hat{\mathcal{B}}(x', t') &= e^{i\hat{H}t'} \hat{B}(x') e^{-i\hat{H}t'}, \end{aligned} \quad (1.12)$$

уколико оператори $A(x)$ и $B(x')$ не зависе експлицитно од времена (што је и претпостављено у

(1.12)), тј. $\frac{\partial A(x)}{\partial t} = \frac{\partial B(x')}{\partial t} = 0$, $\Gamma\Phi$ ће зависити од разлике временских координата $(t - t')$. Ово можемо видети ако потражимо величину $F(t, t') = \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle$:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle &= Z^{-1} \text{Tr} \left(e^{i\hat{H}t} \hat{A}(x) e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t'} \hat{B}(x') e^{-i\hat{H}t'} e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} \right) \\
&= Z^{-1} \text{Tr} \left(e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} e^{i\hat{H}t} \hat{A}(x) e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t'} \hat{B}(x') e^{-i\hat{H}t'} \right) \\
&= Z^{-1} \text{Tr} \left(e^{-i\hat{H}t'} e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} e^{i\hat{H}t} \hat{A}(x) e^{-i\hat{H}t} e^{i\hat{H}t'} \hat{B}(x') \right) \\
&= Z^{-1} \text{Tr} \left(e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}} e^{i\hat{H}(t-t')} \hat{A}(x) e^{-i\hat{H}(t-t')} \hat{B}(x') \right) \\
&= F(t - t'),
\end{aligned} \tag{1.13}$$

где смо искористили чињеницу да величине $e^{-\frac{\hat{H}}{k_B T}}$ и $e^{-i\hat{H}t'}$ комутирају. Аналогно важи и за $\langle \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \rangle$, на основу чега закључујемо да Гринова функција зависи од *разлике* времена t и t' . Као што је речено на почетку ове главе, уз помоћ Гринових функција можемо одредити енергију елементарних екситација и магнетизацију. Да бисмо то урадили, потребно је најпре одредити Гринову функцију. То можемо урадити полазећи од једначине кретања за Гринову функцију која је дата као (узето је да је $\hbar = 1$)

$$\begin{aligned}
i \frac{dG(x - x', t - t')}{dt} &= i \frac{d}{dt} \left[\theta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')] \rangle \right] \\
&= i \frac{d\theta(t - t')}{dt} \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')] \rangle + \theta(t - t') \langle [i \frac{d\hat{\mathcal{A}}(x, t)}{dt}, \hat{\mathcal{B}}(x', t')] \rangle.
\end{aligned} \tag{1.14}$$

У наставку користимо чињеницу да је извод Хевисајдове степ функције једнак Дираковој делта функцији, тј. $\frac{d\theta(t-t')}{dt} = \delta(t - t')$ [7]. С обзиром да операторе пишемо у Хајзенберговој слици (1.12), извод оператора $\hat{\mathcal{A}}(x, t)$ по времену можемо записати као

$$\begin{aligned}
i \frac{d\hat{\mathcal{A}}(x, t)}{dt} &= i^2 \hat{H} e^{i\hat{H}t} \hat{A}(x) e^{-i\hat{H}t} + i e^{i\hat{H}t} \hat{A}(x) (-i\hat{H}) e^{-i\hat{H}t} = -\hat{H} \hat{\mathcal{A}}(x, t) + \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{H} \\
&= [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}].
\end{aligned} \tag{1.15}$$

Тиме смо добили Хајзенбергову једначину кретања. Након тога израз (1.10) можемо записати као

$$\begin{aligned}
i \frac{dG(x-x', t-t')}{dt} &= i\delta(t-t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')] \rangle + \theta(t-t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}], \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \\
&= i\delta(t-t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t)] \rangle + \langle \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}] | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle \\
&= i\delta(t-t') Q(x-x') + G_1(x-x', t-t'),
\end{aligned} \tag{1.16}$$

где због присуства Диракове делта функције (која је различита од нуле за $t = t'$) комутатор оператора $\hat{\mathcal{A}}(x, t)$ и $\hat{\mathcal{B}}(x', t')$ рачунамо у истом временском тренутку, тј.

$$\delta(t-t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')] \rangle = \delta(t-t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t)] \rangle \equiv \delta(t-t') Q(x-x'). \tag{1.17}$$

Из (1.16) може се видети да је величина $G_1(x-x', t-t') \equiv \langle \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{H}] | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle$ задата у аналогном облику као и почетна Гринава функција G и назива се виша Гринава функција. Да бисмо из израза (1.16) нашли $G(x-x', t-t')$ пожељно је да са координата (x, x') и времена (t, t') пређемо на импулс k и фреквенцију ω користећи Фурије трансформације

$$\begin{aligned}
G(x-x', t-t') &= \frac{1}{N} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G(k, \omega) e^{ik(x-x')} e^{-i\omega(t-t')}, \\
\delta(t-t') &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')}, \\
Q(x-x') &= \frac{1}{N} \sum_k Q(k) e^{ik(x-x')}, \\
G_1(x-x', t-t') &= \frac{1}{N} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_1(k, \omega) e^{ik(x-x')} e^{-i\omega(t-t')},
\end{aligned} \tag{1.18}$$

где је N број чворова посматране кристалне решетке. Једначина (1.16) сада добија облик

$$\begin{aligned}
i \frac{d}{dt} \left(\frac{1}{N} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G(k, \omega) e^{ik(x-x')} e^{-i\omega(t-t')} \right) &= i \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{1}{N} \sum_k Q(k) e^{ik(x-x')} \\
&+ \frac{1}{N} \sum_k \int_{-\infty}^{\infty} d\omega G_1(k, \omega) e^{ik(x-x')} e^{-i\omega(t-t')}.
\end{aligned} \tag{1.19}$$

У горњем изразу може се уочити да извод по времену делује само на $e^{-i\omega(t-t')}$. Да би уклонили интеграле и суме, потребно је израз (1.19) помножити са $\sum_{x-x'} e^{-iq(x-x')} \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{i\omega'(t-t')}$, чиме добијамо Кронекеров симбол $N\delta_{k,q} = \sum_{x-x'} e^{i(k-q)(x-x')}$ и Диракову делта функцију $2\pi\delta(\omega - \omega') = \int_{-\infty}^{\infty} d(t-t') e^{i(\omega-\omega')(t-t')}$. Након уклањања сума и интеграла и преласка $q \rightarrow k$ и $\omega' \rightarrow \omega$ добијамо

$$\omega G(k, \omega) = \frac{i}{2\pi} Q(k) + G_1(k, \omega). \tag{1.20}$$

Као што видимо из (1.20), да бисмо одредили $G(k, \omega)$ морамо знати и $G_1(k, \omega)$ што у општем случају значи да морамо да одредимо једначину кретања и за $G_1(k, \omega)$. У том случају бисмо у једначини кретања за $G_1(k, \omega)$ добили нову (вишу) Гринову функцију $G_2(k, \omega)$ за коју би исто требало тражити једначину кретања, чиме бисмо поново добили вишу ГФ $G_3(k, \omega)$. Оваквим поступком добијамо бесконачан низ једначина кретања где се наредна Гринова функција израчунава помоћу претходне. Да бисмо могли да одредимо Гринову функцију потребно је да се овај низ прекине на такав начин да вишу ГФ изразимо преко прве ниже. Ако претпоставимо да вишу ГФ $G_1(k, \omega)$ можемо апроксимирати помоћу $G(k, \omega)$ као $G_1(k, \omega) = \omega_k G(k, \omega)$, онда коришћењем (1.20) добијамо

$$G(k, \omega) = \frac{i}{2\pi} \frac{Q(k)}{\omega - \omega_k}. \tag{1.21}$$

Знајући да реални део пола ГФ одређује енергију елементарних екситација у систему, закључујемо да је величина ω_k дисперзиона релација, односно да она одређује зависност енергије елементарних екситација од таласног вектора k [7].

Главна примена Гринових функција се заснива на коришћењу спектралне теореме која омогућава рачунање средњих вредности производа оператора [7]

$$\begin{aligned} J_{\mathcal{B}\mathcal{A}} = \langle \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}} \rangle_k &= \lim_{\mu \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\langle \langle \hat{\mathcal{A}} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \rangle_{\omega + i\mu} - \langle \langle \hat{\mathcal{A}} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \rangle_{\omega - i\mu}}{e^{\beta\omega} - 1} \\ &= \lim_{\mu \rightarrow 0} \frac{i}{2\pi} \sum_{\alpha} A_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \left[\frac{1}{\omega - \omega_{\alpha} + i\mu} - \frac{1}{\omega - \omega_{\alpha} - i\mu} \right], \end{aligned} \quad (1.22)$$

где $\langle \dots \rangle_k$ означава да смо прешли у реципрочни k простор, $\beta = \frac{1}{k_B T}$, а $\langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_{\omega \pm i\mu}$ је Гринова функција коју смо, водећи се изразом (1.21), записали као

$$\langle \langle \hat{\mathcal{A}} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \sum_{\alpha} \frac{A_{\alpha}}{\omega - \omega_{\alpha}} \quad (1.23)$$

Користећи релацију [7]

$$\frac{1}{x \pm i\mu} = P \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad \mu \rightarrow 0 \quad (1.24)$$

где P означава главну вредност одговарајућег интеграла, израз (1.22) постаје

$$\begin{aligned} J_{\hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}} = \langle \hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}} \rangle_k &= \frac{i}{2\pi} \sum_{\alpha} A_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} \left[P \frac{1}{\omega - \omega_{\alpha}} - i\pi\delta(\omega - \omega_{\alpha}) - P \frac{1}{\omega - \omega_{\alpha}} - i\pi\delta(\omega - \omega_{\alpha}) \right] \\ &= \frac{i}{2\pi} \sum_{\alpha} A_{\alpha} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{d\omega}{e^{\beta\omega} - 1} (-2i\pi\delta(\omega - \omega_{\alpha})) \\ &= \sum_{\alpha} \frac{A_{\alpha}}{e^{\beta\omega_{\alpha}} - 1}. \end{aligned} \quad (1.25)$$

Корелационе функције $J_{\hat{B}\hat{A}}$ и $J_{\hat{A}\hat{B}}$ су повезане као $J_{\hat{A}\hat{B}} = e^{\beta\omega_\alpha} J_{\hat{B}\hat{A}}$ [7], на основу чега је

$$J_{\hat{A}\hat{B}} = \sum_{\alpha} \frac{A_{\alpha}}{1 - e^{\beta\omega_{\alpha}}}. \quad (1.26)$$

Уз помоћ корелационе функције, сада је могуће наћи магнетизацију система. У случају Хајзенберговог антиферомагнета магнетизација за, на пример, подрешетку a дата (са спином $S = \frac{1}{2}$) је као [8]

$$\hat{\sigma} = \frac{1}{2} - \frac{1}{N_a} \sum_k \langle \hat{S}^- \hat{S}^+ \rangle_k, \quad (1.27)$$

где је N_a број чворова подрешетке. Када је релација за магнетизацију (1.27) експлицитно позната, уз помоћ ње можемо наћи температуру фазног прелаза користећи услов да на тој температури магнетизација постаје једнака нули.

2 Магнетна својства дводимензионалног Хајзенберговог антиферромагнета са Ђалошински-Морија интеракцијом у оквиру методе Гринових функција

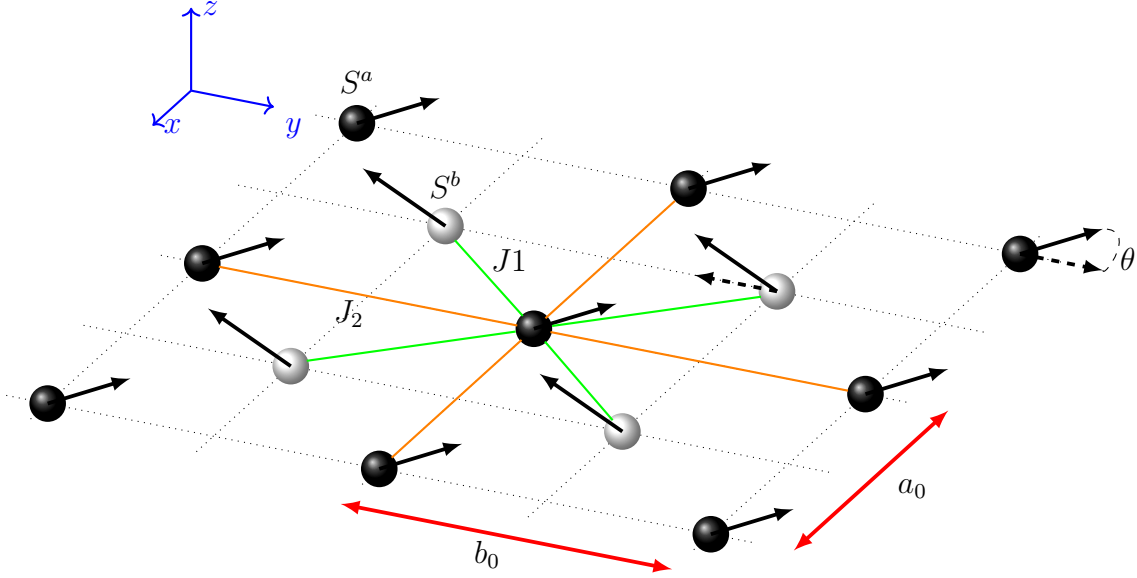
У овој глави анализираћемо магнетна својства фрустрираног 2D антиферромагнета са спинском анизотропијом и Ђалошински-Морија интеракцијом [9]. Оно што желимо да одредимо су дисперзиона релација и магнетизација у оквиру методе Гринових функција са тјабликовском апроксимацијом.

2.1 Моделни хамилтонијан

Мермин-Вагнерова теорема [10] тврди да дводимензионални изотропни Хајзенбергов модел не поседује спонтану магнетизацију на коначним температурама. Да би се појавила спонтане магнетизације уводимо спинску анизотропију између првих најближих суседа и Ђалошински-Морија интеракцију. Поред ових анизотропија, у моделу узимамо у обзир и интеракцију других најближих суседа чиме долази до фрустрације која утиче на понашање система. Хамилтонијан овог модела, за спин $S = \frac{1}{2}$, дат је као [9]

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J_1 \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{x(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} + \alpha \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \\ & - \mathcal{D} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} - \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} \right) \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\substack{\mathbf{n}_\nu, \delta_2 \\ \nu=a,b}} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_\nu}^{x(\nu)} \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{x(\nu)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \right), \end{aligned} \quad (2.1)$$

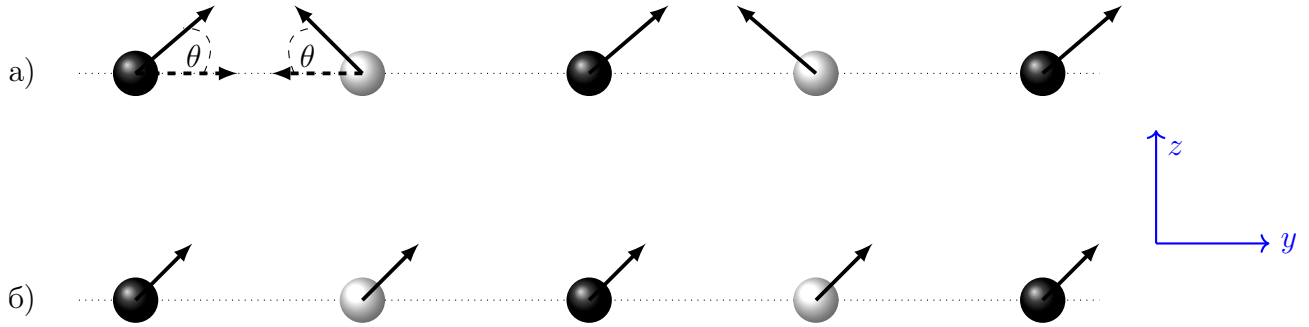
где је J_1 интеракција првих најближих суседа, J_2 интеракција других најближих суседа (у трећем члану је убачена $\frac{1}{2}$ да би се избегло двоструко рачунање исте интеракције), $\mathcal{D}$ је Ђалошински-Морија интеракција, $\mathbf{n}_\nu$ ($\nu = a, b$) вектор положаја спина у подрешетки ν , δ_1 и δ_2 повезују прве и друге најближе суседе респективно, а α означава спинску анизотропију између првих најближих суседа. Ђалошински-Морија интеракција доводи до ротације спинова за мали угао θ , у yz -равни спинова, што се може видети на Слици 2.1. На Слици 2.1 приказана је и



Слика 2.1: Приказ положаја спинова на подрешеткама a и b у присуству интеракција J_1 , J_2 и $\mathcal{D}$. Параметри решетке у правцу x -осе и y -осе су означени са a_0 и b_0 респективно [9]. Зеленом линијом је представљена интеракција најближих суседа, а наранџастом интеракција других најближих суседа.

интеракција првих и других суседа на основу чега можемо видети да постоје $z_1 = 4$ првих и $z_2 = 4$ других најближих суседа. Испрекиданом линијом приказан је положај спинова у одсуству Ђалошински-Морија интеракције. Детаљнији приказ положаја спинова дат је на Слици 2.2 а). На тој слици уједно примећујемо да су y -компоненте спинова подрешетке a и b уређене антипаралелно (антиферомагнетно), док су z -компоненте уређене паралелно (феромагнетно) због чега други члан у хамилтонијану (2.1) има негативан предзнак.

Да бисмо одредили дисперзиону релацију и магнетизацију користићемо методу Гринових функција са тјабликовском апроксимацијом. Пре него што се то уради потребно је одредити зависност између угла θ и редукованих параметара $p = \frac{J_2}{J_1}$ и $d = \frac{\mathcal{D}}{J_1}$. То се може урадити минимизацијом енергије основног стања H_0 по углу θ . Да бисмо ово урадили заротираћемо најпре подрешетку b за 180° око z -осе као што је приказано на Слици 2.2 б) [11, 12]. Компоненте спина који припада подрешетки b након трансформације гласе



Слика 2.2: Приказ дејства Ђалошински-Морија интеракције. Под *a*) спинови су ротирани за угао θ у yz равни у односу на xy раван. Под *b*) приказ магнетне решетке након ротације спинова у подрешетки *b* за 180° око z -осе.

$$\begin{bmatrix} \hat{S}^{x(b)} \\ \hat{S}^{y(b)} \\ \hat{S}^{z(b)} \end{bmatrix} \rightarrow \begin{bmatrix} -\hat{S}^{x(b)} \\ -\hat{S}^{y(b)} \\ \hat{S}^{z(b)} \end{bmatrix}. \quad (2.2)$$

Хамилтонијан (2.1) сада постаје

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J_1 \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left(-\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{x(b)} - \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} + \alpha \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \\ & - \mathcal{D} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} \right) \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{x(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{y(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{z(a)} \right) \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_b, \delta_2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{x(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_2}^{x(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{y(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_2}^{y(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_2}^{z(b)} \right). \end{aligned} \quad (2.3)$$

Да бисмо одредили енергију основног стања морамо узети у обзир да је у основном стању $\hat{S}^y \rightarrow S \cos \theta$ и $\hat{S}^z \rightarrow S \sin \theta$ (где је S пројекција спина). Тако је

$$\begin{aligned}
H_0 = & \frac{J_1 N z_1}{2} (-S^2 \sin^2 \theta + \alpha S^2 \cos^2 \theta) \\
& - \frac{D N z_1}{2} (S^2 \sin \theta \cos \theta + S^2 \sin \theta \cos \theta) \\
& + \frac{J_2 N z_2}{2} (S^2 \sin^2 \theta + S^2 \cos^2 \theta) \\
& + \frac{J_2 N z_2}{2} (S^2 \sin^2 \theta + S^2 \cos^2 \theta),
\end{aligned} \tag{2.4}$$

где је N број чворова. Услов да енергија H_0 има минимум гласи

$$\frac{\partial H_0}{\partial \theta} = \frac{J_1 N z_1}{2} (2S^2 \sin \theta \cos \theta + 2\alpha S^2 \sin \theta \cos \theta) - \frac{2D S^2 N z_1}{2} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) = 0. \tag{2.5}$$

Користећи тригонометријске идентитете $2 \sin \theta \cos \theta = \sin 2\theta$ и $\cos^2 \theta - \sin^2 \theta = \cos 2\theta$ добијамо

$$\frac{J_1}{2} \sin 2\theta (1 + \alpha) - D \cos 2\theta = 0, \tag{2.6}$$

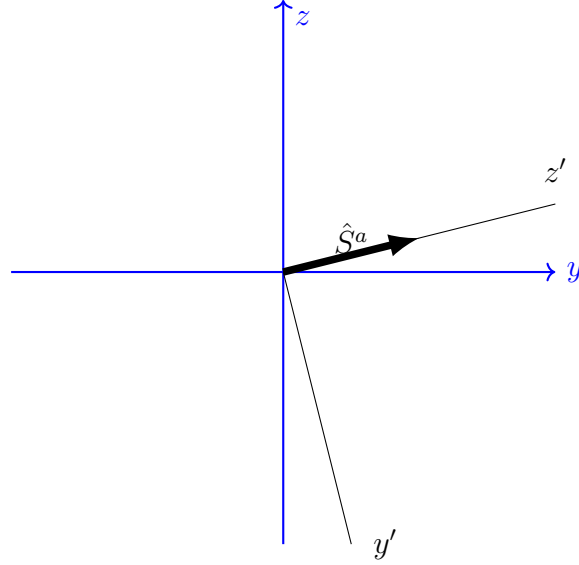
одакле следи да је

$$\tan 2\theta = \frac{D}{J_1} \frac{2}{1 + \alpha} = \frac{2d}{1 + \alpha}, \tag{2.7}$$

уз напомену да угао θ не зависи од J_2 . У наставку претпостављамо да се овај угао неће мењати ни када уведемо пуни квантни Хамилтонијан [13].

Дисперзиону релацију и магнетизацију одредићемо уз помоћ Гринових функција облика $\langle\langle \hat{S}^+ | \hat{B} \rangle\rangle$ (подсећамо да је $\hat{B}$ произвољни оператор), услед чега хамилтонијан (2.1) треба изразити користећи операторе подизања и спуштања $\hat{S}^\pm$. Пре него што то урадимо, заротираћемо координатни систем тако да се његова z -оса поклапа са смером спина за сваку подрешетку

појединачно чиме добијамо нове спинске операторе. Ротација подрешетке a приказана је на Слици 2.3 [11, 12]. Примећујемо да правац x -осе остаје непромењен.



Слика 2.3: Приказ ротације координатног система за подрешетку a .

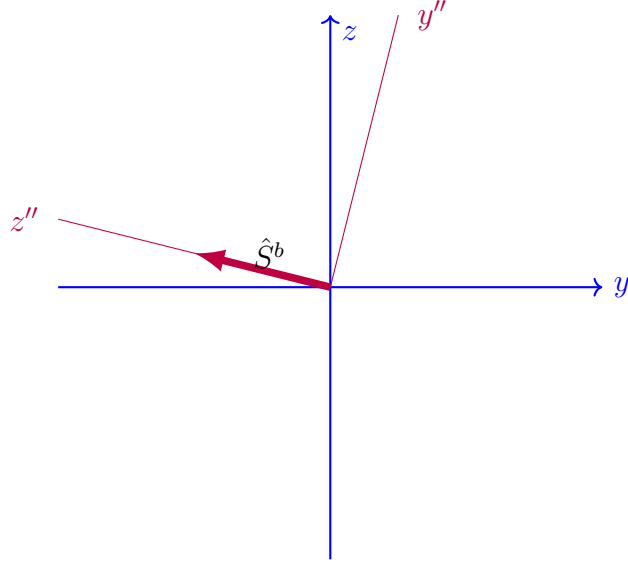
Овакву трансформацију матрично записујемо као

$$\begin{bmatrix} \hat{S}^{x(a)} \\ \hat{S}^{y(a)} \\ \hat{S}^{z(a)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sin \theta & \cos \theta \\ 0 & -\cos \theta & \sin \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}^{x(a)} \\ \hat{\sigma}^{y(a)} \\ \hat{\sigma}^{z(a)} \end{bmatrix}, \quad (2.8)$$

тако да веза између компоненти старих ($\hat{S}$) и нових ($\hat{\sigma}$) спинова гласи

$$\begin{aligned} \hat{S}^{x(a)} &= \hat{\sigma}^{x(a)}, \\ \hat{S}^{y(a)} &= \sin \theta \hat{\sigma}^{y(a)} + \cos \theta \hat{\sigma}^{z(a)}, \\ \hat{S}^{z(a)} &= -\cos \theta \hat{\sigma}^{y(a)} + \sin \theta \hat{\sigma}^{z(a)}. \end{aligned} \quad (2.9)$$

За подрешетку b ротацију вршимо у супротном смеру. Ова трансформација је приказана на Слици 2.4.



Слика 2.4: Приказ ротације координатног система за подрешетку b .

Одговарајућу трансформацију записујемо као

$$\begin{bmatrix} \hat{S}^{x(b)} \\ \hat{S}^{y(b)} \\ \hat{S}^{z(b)} \end{bmatrix} = \begin{bmatrix} 1 & 0 & 0 \\ 0 & \sin \theta & -\cos \theta \\ 0 & \cos \theta & \sin \theta \end{bmatrix} \begin{bmatrix} \hat{\sigma}^{x(b)} \\ \hat{\sigma}^{y(b)} \\ \hat{\sigma}^{z(b)} \end{bmatrix}, \quad (2.10)$$

односно

$$\begin{aligned} \hat{S}^{x(b)} &= \hat{\sigma}^{x(b)}, \\ \hat{S}^{y(b)} &= \sin \theta \hat{\sigma}^{y(b)} - \cos \theta \hat{\sigma}^{z(b)}, \\ \hat{S}^{z(b)} &= \cos \theta \hat{\sigma}^{y(b)} + \sin \theta \hat{\sigma}^{z(b)}. \end{aligned} \quad (2.11)$$

Хамилтонијан (2.1) изражен преко нових спинских оператора гласи

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & J_1 \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^x \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^x + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^y \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^y + \alpha \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^z \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^z \right) \\
& - \mathcal{D} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^y \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^z + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^z \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^y \right) \\
& + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_\nu}^x \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^x + \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu}^y \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^y + \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu}^z \hat{S}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^z \right) = \\
& J_1 \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{x(b)} + \left(\sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} + \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \right) \left(\sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} - \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \right. \\
& \left. + \alpha \left(-\cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} + \sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \right) \left(\cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} + \sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \right] \\
& - \mathcal{D} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\left(\sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} + \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \right) \left(\cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} + \sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \right. \\
& \left. - \left(-\cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} + \sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \right) \left(\sin \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} - \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \right] \\
& + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{x(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{x(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \right. \\
& \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \\
& + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \\
& \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \left. \right].
\end{aligned} \tag{2.12}$$

Даље је

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & J_1 \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{x(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} \left(\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta \right) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \left(-\sin \theta \cos \theta (1 + \alpha) \right) \right. \\
& \left. + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} \left(\sin \theta \cos \theta (1 + \alpha) \right) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \left(-\cos^2 \theta + \alpha \sin^2 \theta \right) \right] \\
& - \mathcal{D} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} 2 \sin \theta \cos \theta + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \left(\sin^2 \theta - \cos^2 \theta \right) \right. \\
& \left. + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} \left(\cos^2 \theta - \sin^2 \theta \right) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} 2 \sin \theta \cos \theta \right]
\end{aligned} \tag{2.13}$$

$$\begin{aligned}
& + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{x(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{x(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \right. \\
& \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \\
& \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \left. \right].
\end{aligned}$$

Након одговарајућег груписања чланова по спинским операторима добијамо

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[J_1 \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{x(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} (J_1 (\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta) - 2\mathcal{D} \sin \theta \cos \theta) \right. \\
& + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} (J_1 (\alpha \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - 2\mathcal{D} \sin \theta \cos \theta) \\
& + \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \left(J_1 \sin \theta \cos \theta (1 + \alpha) - \mathcal{D} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta) \right) \left. \right] \\
& + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{x(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{x(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \right. \\
& \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \\
& + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \left. \right].
\end{aligned} \tag{2.14}$$

Примећује се да члан $(J_1 \sin \theta \cos \theta (1 + \alpha) - \mathcal{D} (\cos^2 \theta - \sin^2 \theta))$ у (2.14) нестаје ако се искористи релација (2.7), тј. (2.6), те израз (2.14) постаје

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[J_1 \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{x(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{x(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{y(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{y(b)} (J_1 (\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta) - 2\mathcal{D} \sin \theta \cos \theta) \right. \\
& + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} (J_1 (\alpha \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - 2\mathcal{D} \sin \theta \cos \theta) \left. \right] \\
& + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{x(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{x(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \right. \\
& \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \pm \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \\
& + \cos^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{y(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \mp \sin \theta \cos \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{y(\nu)} + \sin^2 \theta \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \left. \right].
\end{aligned} \tag{2.15}$$

Као што смо већ рекли, да бисмо методом ГФ одредили величине као што су дисперзиона релација и магнетизација, потребно је да хамилтонијан запишемо користећи операторе подизања и спуштања $\hat{\sigma}^{\pm}$. Ове операторе дефинишемо као

$$\begin{aligned}\hat{\sigma}^x &= \frac{\hat{\sigma}^+ + \hat{\sigma}^-}{2}, \\ \hat{\sigma}^y &= \frac{\hat{\sigma}^+ - \hat{\sigma}^-}{2i},\end{aligned}\tag{2.16}$$

где смо ради сажетости игнорисали ознаке које указују на подрешетку и чвор. Након прелажења на операторе $\hat{\sigma}^{\pm}$ израз (2.15) постаје

$$\begin{aligned}\hat{H} &= \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\frac{J_1}{4} (\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)}) (\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)}) \right. \\ &\quad - \frac{1}{4} (\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)}) (\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)}) (J_1 (\alpha \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - \mathcal{D} \sin 2\theta) \\ &\quad + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} (J_1 (\alpha \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - \mathcal{D} \sin 2\theta) \Big] \\ &\quad + \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{+(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{-(\nu)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{-(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{+(\nu)}) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \right] = \\ &\quad \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} \right) \left(\frac{J_1}{4} + \frac{J_1}{4} (\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta - d \sin 2\theta) \right) \right. \\ &\quad + \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right) \left(\frac{J_1}{4} - \frac{J_1}{4} (\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta - d \sin 2\theta) \right) \\ &\quad + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} (J_1 (\alpha \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - \mathcal{D} \sin 2\theta) \Big] \\ &\quad + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\frac{1}{2} (\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{+(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{-(\nu)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{-(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{+(\nu)}) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \right].\end{aligned}\tag{2.17}$$

Најзад, хамилтонијан (2.17) може се сажетије записати као

$$\begin{aligned} \hat{H} = \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[A' \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} \right) + B' \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right) \right. \\ \left. + C' \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \right] + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{+(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{-(\nu)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{-(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{+(\nu)} \right) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \right], \end{aligned} \quad (2.18)$$

где су коришћене ознаке

$$\begin{aligned} A' &= \frac{J_1}{4} + \frac{J}{4} (\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta - d \sin 2\theta), \\ B' &= \frac{J_1}{4} - \frac{J}{4} (\sin^2 \theta - \alpha \cos^2 \theta - d \sin 2\theta), \\ C' &= J_1 (\alpha \sin^2 \theta - \cos^2 \theta) - \mathcal{D} \sin 2\theta. \end{aligned} \quad (2.19)$$

Ако искористимо тригонометријски идентитет $\sin^2 \theta = 1 - \cos^2 \theta$, релације (2.19) постају

$$\begin{aligned} A' &= \frac{J_1}{2} - \frac{J_1}{4} (1 + \alpha) \cos^2 \theta - \frac{dJ_1}{4} \sin 2\theta, \\ B' &= \frac{J_1}{4} (1 + \alpha) \cos^2 \theta + \frac{dJ_1}{4} \sin 2\theta, \\ C' &= J_1 [\alpha - (1 + \alpha) \cos^2 \theta - d \sin 2\theta]. \end{aligned} \quad (2.20)$$

2.2 Одређивање спектра елементарних екситација

У прошлом одељку одредили смо зависност угла θ од Ђалошински-Морија интеракције $\mathcal{D}$ и спинске анизотропије α и ротирањем координатног система тако да се z -оса поклапа са смером спинова подрешетки a и b прешли са почетног хамилтонијана (2.1) на нови хамилтонијан (2.18). Сада можемо методом Гринових функција одредити дисперзиону релацију, односно, спектар елементарних екситација, јер, као што смо видели у Глави 1, реални пол $\Gamma\Phi$ даје спектар елементарних екситација. У том циљу, наћи ћемо Гринову функцију $\langle\langle \hat{\sigma}^{\pm(a/b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle_{\mathbf{k}, \omega} \equiv G^{\pm(a/b)}$ (где ознака $\langle\langle \dots \rangle\rangle_{\mathbf{k}, \omega}$ говори да се ради о простору импулса $\mathbf{k}$ и фреквенције ω и у наставку ће бити занемарена).

Да бисмо нашли $\Gamma\Phi$, најпре морамо саставити једначину кретања за оператор $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}$

$$\begin{aligned}
i \frac{d\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}}{dt} &= [\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{H}] = \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[A' \left(\left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} \right] \right) \right. \\
&+ C' \left(\left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right] \right) + B' \left(\left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right] \right) \Big] \\
&+ \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\frac{1}{2} \left(\left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{+(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{-(\nu)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{-(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{+(\nu)} \right] \right) + \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu + \delta_2}^{z(\nu)} \right] \right].
\end{aligned} \tag{2.21}$$

Знајући да спински оператори комутирају када припадају различитим подрешеткама, као и својство комутатора $[A, BC] = B[A, C] + [A, B]C$ и комутационе релације (1.6), добијамо

$$\begin{aligned}
i \frac{d\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}}{dt} &= \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} A' \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right] + \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} \right] \right. \\
&\left. \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} \right) \\
&+ \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} B' \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} \right] + \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right] \right. \\
&\left. \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right) \\
&+ \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} C' \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right] + \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right) \\
&+ J_2 \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{-(a)} \right] + \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{-(a)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{+(a)} \right] \right. \right. \\
&\left. \left. \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{+(a)} \right) + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{z(a)} \right] + \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \right] \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{z(a)} \right].
\end{aligned} \tag{2.22}$$

Након одређивања комутационих релација и преласка са $\mathbf{n}'_a$ на $\mathbf{n}_a$, једначина кретања за спински оператор $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}$ постаје

$$\begin{aligned} i \frac{d\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}}{dt} = & A' \sum_{\delta_1} 2\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{+(b)} + B' \sum_{\delta_1} 2\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{-(b)} \\ & - C' \sum_{\delta_1} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{z(b)} + 2J_2 \sum_{\delta_2} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{z(a)} \right]. \end{aligned} \quad (2.23)$$

Сада прелазимо на рачунање Гринове функције $\langle\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle = G_a^{+(a)}$. Једначина кретања за ову ГФ гласи

$$i \frac{dG_a^{+(a)}}{dt} = i\delta(t-t') \langle[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}, \hat{\mathcal{B}}]\rangle + \langle\langle [\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}, \hat{H}] | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle. \quad (2.24)$$

Трансформацијом датом изразом (1.18) прелазимо са времена на фреквенцију (занемарена је експлицитна зависност од ω)

$$\omega G_a^{+(a)} = \frac{i}{2\pi} \langle[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}, \hat{\mathcal{B}}]\rangle + \langle\langle [\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}, \hat{H}] | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle. \quad (2.25)$$

Користећи једначину (2.23), израз (2.25) постаје

$$\begin{aligned} \omega G_a^{+(a)} = & \frac{i}{2\pi} \langle[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}, \hat{\mathcal{B}}]\rangle + \sum_{\delta_1} \left[2A' \langle\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{+(b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle - C' \langle\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{z(b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle \right. \\ & \left. + 2B' \langle\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{-(b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle \right] + J_2 \sum_{\delta_2} \left[\langle\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle - \langle\langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{z(a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.26)$$

Видимо да у (2.26) фигурише виша Гринова функција облика $\langle\langle \hat{\sigma}_g^z \hat{\sigma}_g^+ | \hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle$. Применом тјабликовске апроксимације [7, 8], ове ГФ могу се декупловати на следећи начин (узимајући у обзир да је $f \neq g$)

$$\langle\langle\hat{\sigma}_g^z\hat{\sigma}_f^+|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle = \langle\hat{\sigma}_g^z\rangle\langle\langle\hat{\sigma}_f^+|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle. \quad (2.27)$$

Тјабликовска апроксимација се заснива на занемаривању корелације између лонгитудиналних и трансверзалних компоненти спина на различитим чворовима решетке, при чему се z -компонента спина замењује њеном средњом вредношћу $\langle\hat{S}^z\rangle$ која не зависи од избора чвора (због транслаторне инваријантности). Претпостављајући да је средња вредност z -компоненте спинског оператора, $\hat{\sigma}^z$, једнака за обе подрешетке, тј. $\langle\hat{\sigma}_g^z\rangle = \langle\hat{\sigma}_g^{z(a)}\rangle = \langle\hat{\sigma}_g^{z(b)}\rangle \equiv \sigma$, израз (2.26) постаје

$$\begin{aligned} \omega G_a^{+(a)} = & \frac{i}{2\pi} \left\langle \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}, \hat{\mathcal{B}} \right] \right\rangle + \sum_{\delta_1} \left[2A'\sigma\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{+(b)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle - C'\sigma\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle \right. \\ & \left. + 2B'\sigma\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{-(b)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle \right] + J_2 \sum_{\delta_2} \left[\sigma\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle - \sigma\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle \right]. \end{aligned} \quad (2.28)$$

У наставку вршимо Фурије трансформацију, којом прелазимо у реципрочни простор, водећи рачуна да постоје два различита типа величина које трансформишемо: $\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle$ и $\langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_i}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle$ (где је $i = 1, 2$), при чему узимамо у обзир да је $\hat{\mathcal{B}} \equiv \hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{n}'_a}$. Трансформација је тада дата као

$$\begin{aligned} \sum_{\delta_i} \langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{n}'_a}\rangle\rangle &= \frac{1}{N_a} \sum_{\delta_1, \mathbf{k}} \langle\langle\hat{\sigma}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}_a-\mathbf{n}'_a)} = \frac{z_i}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle\langle\hat{\sigma}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}_a-\mathbf{n}'_a)}, \\ \sum_{\delta_i} \langle\langle\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_i}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}_{\mathbf{n}'_a}\rangle\rangle &= \frac{1}{N_a} \sum_{\delta_i, \mathbf{k}} \langle\langle\hat{\sigma}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}_a+\delta_i-\mathbf{n}'_a)} = \frac{z_i}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \gamma_{i\mathbf{k}} \langle\langle\hat{\sigma}^{+(a)}|\hat{\mathcal{B}}\rangle\rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot(\mathbf{n}_a-\mathbf{n}'_a)}, \end{aligned} \quad (2.29)$$

где је N_a број чворова подрешетке a , а $\gamma_{i\mathbf{k}}$ су геометријски фактори дефинисани као $\gamma_{i\mathbf{k}} = \frac{1}{z_i} \sum_{\delta_i} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta_i}$ ($i = 1, 2$). Увођењем Фурије трансформације (2.29), израз (2.28) постаје (у наставку ћемо изоставити навођење експлицитне зависности од $\mathbf{k}$, тј. $\langle\langle\ldots\rangle\rangle_{\mathbf{k}} \equiv \langle\langle\ldots\rangle\rangle$)

$$\begin{aligned} \frac{\omega}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} G^{+(a)} = & \frac{i}{2\pi} \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle [\hat{\sigma}^{+(a)}, \hat{\mathcal{B}}] \rangle + \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[2A' \sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} \langle \hat{\sigma}^{+(b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle - C' \sigma z_1 \langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \mathcal{B} \rangle \right. \\ & \left. + 2B' \sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} \langle \hat{\sigma}^{-(b)} | \mathcal{B} \rangle + J_2 (\sigma z_2 \gamma_{2\mathbf{k}} \langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \mathcal{B} \rangle - \sigma z_2 \langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \mathcal{B} \rangle) \right]. \end{aligned} \quad (2.30)$$

Уводећи нове Гринове функције $G^{-(a)} \equiv \langle \langle \hat{\sigma}^{-(a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \rangle$, $G^{+(b)} \equiv \langle \langle \hat{\sigma}^{+(b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \rangle$ и $G^{-(b)} \equiv \langle \langle \hat{\sigma}^{-(b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \rangle$ добијамо

$$(\omega + C' \sigma z_1 + J_2 z_2 \sigma (1 - \gamma_{2\mathbf{k}})) G^{+(a)} = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{\sigma}^{+(a)}, \hat{\mathcal{B}}] \rangle + 2A' \sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{+(b)} + 2B' \sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{-(b)}, \quad (2.31)$$

што, ако укључимо још и члан $0 \cdot G^{-(a)}$, представља једначину са четири непознате ГФ. Према томе, потребне су нам још три једначине које добијамо тражењем једначина кретања за преостале ГФ.

По аналогiji са горњим поступком, наћи ћемо једначине кретања за операторе $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)}$, као и $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_b}^{\pm(b)}$. Једначина кретања за оператор $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}$ постаје

$$\begin{aligned} i \frac{d\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}}{dt} = & [\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}, \hat{H}] = \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[A' \left([\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{-(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{+(b)}] \right) \right. \\ & \left. + C' \left([\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{z(b)}] \right) + B' \left([\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{+(b)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{-(b)}] \right) \right] \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_\nu, \delta_2} \left[\frac{1}{2} \left([\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{+(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu+\delta_2}^{-(\nu)} + \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{-(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu+\delta_2}^{+(\nu)}] \right) + [\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)}, \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu}^{z(\nu)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_\nu+\delta_2}^{z(\nu)}] \right] \\ & = A' \sum_{\delta_1} \left(-2\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a+\delta_1}^{-(b)} \right) + B' \sum_{\delta_1} \left(-2\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a+\delta_1}^{+(b)} \right) + C' \sum_{\delta_1} \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a+\delta_1}^{z(b)} \right) \\ & + 2J_2 \sum_{\delta_2} \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a+\delta_2}^{z(a)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a+\delta_2}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{z(a)} \right]. \end{aligned} \quad (2.32)$$

Користећи (2.32), једначина кретања одговарајуће Гринове функције $G_a^{-(a)}$ гласи

$$\begin{aligned}
\omega G_a^{- (a)} &= \frac{i}{2\pi} \left\langle \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{- (a)}, \hat{\mathcal{B}} \right] \right\rangle + \left\langle \left\langle \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{- (a)}, \hat{H} \right] \hat{\mathcal{B}} \right\rangle \right\rangle \\
&= \frac{i}{2\pi} \left\langle \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{- (a)}, \hat{\mathcal{B}} \right] \right\rangle + \sum_{\delta_1} \left[-2A'\sigma \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{- (b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle + C'\sigma \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{- (a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \right. \\
&\quad \left. - 2B'\sigma \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+ (b)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \right] + J_2 \sum_{\delta_2} \left[\sigma \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{- (a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle - \sigma \langle \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{- (a)} | \hat{\mathcal{B}} \rangle \right],
\end{aligned} \tag{2.33}$$

где смо искористили тјабликовску апроксимацију. Затим вршимо Фурије трансформацију (2.29)

$$\begin{aligned}
\frac{\omega}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} G^{- (a)} &= \frac{i}{2\pi N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left\langle \left[\hat{\sigma}^{- (a)}, \hat{\mathcal{B}} \right] \right\rangle + \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left[-2A\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{- (b)} + C'z_a \sigma G^{- (a)} \right. \\
&\quad \left. - 2B'z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} \sigma G^{+ (b)} + J_2 (\sigma z_2 G^{- (a)} - \sigma z_2 \gamma_{2\mathbf{k}} G^{- (a)}) \right],
\end{aligned} \tag{2.34}$$

и из (2.34) добијамо једначину

$$(\omega - C'z_a \sigma - J_2 \sigma z_2 (1 - \gamma_{2\mathbf{k}})) G^{- (a)} = \frac{i}{2\pi} \left\langle \left[\hat{\sigma}^{- (a)}, \hat{\mathcal{B}} \right] \right\rangle - 2A\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{- (b)} - 2B'z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} \sigma G^{+ (b)}. \tag{2.35}$$

Поступак израчунавања преостале две ГФ неће бити приказан детаљно, већ ће само бити наведене одговарајуће једначине кретања. Дакле, имајући у виду да је

$$\begin{aligned}
i \frac{d\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+ (b)}}{dt} &= \left[\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+ (b)}, \hat{H} \right] = \sum_{\delta_1} \left[-2A'\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a + \delta_1}^{+ (a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{z (b)} - C'\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a + \delta_1}^{z (a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{+ (b)} + 2B'\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a + \delta_1}^{- (a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_a}^{z (b)} \right] \\
&\quad + J_2 \sum_{\delta_2} \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_b + \delta_2}^{+ (b)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_b}^{z (b)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_b}^{+ (b)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}'_b + \delta_2}^{z (b)} \right),
\end{aligned} \tag{2.36}$$

након Фурије трансформације и тјабликовске апроксимације добијамо трећу једначину

$$(\omega + C'\sigma z_1 + J_2\sigma z_2(1 - \gamma_{2\mathbf{k}})) G^{+(b)} = \frac{i}{2\pi} \left\langle [\hat{\sigma}^{+(b)}, \hat{\mathcal{B}}] \right\rangle + 2A'\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{+(a)} + 2B'\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{-(a)}. \quad (2.37)$$

Последњу, четврту, једначину добијамо тражењем једначине кретања за $\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(b)}$

$$\begin{aligned} i \frac{d\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(b)}}{dt} &= [\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(b)}, \hat{H}] = \sum_{\delta_1} \left[-2A'\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{-(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(b)} + C'\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{z(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(b)} - 2B'\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_1}^{+(a)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(b)} \right] \\ &+ J_2 \sum_{\delta_2} \left(\hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{-(b)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{z(b)} - \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a+\delta_2}^{-(b)} \hat{\sigma}_{\mathbf{n}_a}^{z(b)} \right), \end{aligned} \quad (2.38)$$

одакле је

$$(\omega - C'\sigma z_1 - J_2 z_2 \sigma (1 - \gamma_{2\mathbf{k}})) G^{-(b)} = \frac{i}{2\pi} \left\langle [\hat{\sigma}^{-(b)}, \hat{\mathcal{B}}] \right\rangle - 2A'\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{-(a)} - 2B'\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}} G^{+(a)}. \quad (2.39)$$

Користећи ознаке

$$\begin{aligned} Q'_{\mathbf{k}} &= C'\sigma z_1 + J_2 z_2 \sigma (1 - \gamma_{2\mathbf{k}}), \\ P'_{\mathbf{k}} &= 2A'\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}}, \\ R'_{\mathbf{k}} &= 2B'\sigma z_1 \gamma_{1\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (2.40)$$

једначине (2.31), (2.35), (2.37) и (2.39) могу се сажетије записати у облику

$$\begin{aligned} (\omega + Q'_{\mathbf{k}}) G^{+(a)} + 0 \cdot G^{-(a)} - P'_{\mathbf{k}} G^{+(b)} - R'_{\mathbf{k}} G^{-(b)} &= \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{\sigma}^{+(a)}, \mathcal{B}] \rangle, \\ 0 \cdot G^{+(a)} + (\omega - Q'_{\mathbf{k}}) G^{-(a)} + R'_{\mathbf{k}} G^{+(b)} + P'_{\mathbf{k}} G^{-(b)} &= \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{\sigma}^{-(a)}, \mathcal{B}] \rangle, \\ -P'_{\mathbf{k}} G^{+(a)} - R'_{\mathbf{k}} G^{-(a)} + (\omega + Q'_{\mathbf{k}}) G^{+(b)} + 0 \cdot G^{-(b)} &= \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{\sigma}^{+(b)}, \mathcal{B}] \rangle, \\ R'_{\mathbf{k}} G^{+(a)} + P'_{\mathbf{k}} G^{-(a)} + 0 \cdot G^{+(b)} + (\omega - Q'_{\mathbf{k}}) G^{-(b)} &= \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{\sigma}^{-(b)}, \mathcal{B}] \rangle. \end{aligned} \quad (2.41)$$

Да бисмо одредили спектар елементарних ексцитација, потребно је решити горњи систем једначина. У том циљу, наћи ћемо најпре детерминанту овог система D_S , која гласи

$$D_S = \begin{vmatrix} \omega + Q'_k & 0 & -P'_k & -R'_k \\ 0 & \omega - Q'_k & R'_k & P'_k \\ -P'_k & -R'_k & \omega + Q'_k & 0 \\ R'_k & P'_k & 0 & \omega - Q'_k \end{vmatrix}. \quad (2.42)$$

Стандардним поступком за рачунање детерминанте, добијамо да је детерминанта система

$$\begin{aligned} D_S &= \omega^4 + 2\omega^2 (R'^2_k - P'^2_k - Q'^2_k) + R'^4_k - 2R'^2_k Q'^2_k - 2R'^2_k P'^2_k + Q'^4_k - 2P'^2_k Q'^2_k + P'^4_k \\ &= \left((Q'_k - P'_k)^2 - R'^2_k - \omega^2 \right) \left((Q'_k + P'_k)^2 - R'^2_k - \omega^2 \right). \end{aligned} \quad (2.43)$$

Полови $\Gamma\Phi$ одређени су нулама ове детерминанте [7]. Тако добијамо четири величине за $\omega_{i\mathbf{k}}$ ($i = 1, 2, 3, 4$), од којих су две негативне ($\omega_{3\mathbf{k}} = -\omega_{1\mathbf{k}}$ и $\omega_{4\mathbf{k}} = -\omega_{2\mathbf{k}}$), а две позитивне ($\omega_{1\mathbf{k}}$ и $\omega_{2\mathbf{k}}$). С обзиром да нас интересују само енергије елементарних ексцитација, а оне морају бити позитивне, посматрамо само позитивне величине

$$\begin{aligned} \omega_{1\mathbf{k}} &= \sqrt{(Q'_k - P'_k)^2 - R'^2_k}, \\ \omega_{2\mathbf{k}} &= \sqrt{(Q'_k + P'_k)^2 - R'^2_k}. \end{aligned} \quad (2.44)$$

Ако у (2.44) уврстимо експлицитне вредности за Q'_k , P'_k и R'_k , тј. (2.40), добијамо

$$\begin{aligned}
\omega_{1\mathbf{k}} &= \sigma z_1 J_1 \sqrt{\left(C + p(1 - \gamma_{2\mathbf{k}}) - 2A\gamma_{1\mathbf{k}}\right)^2 - \left(2B\gamma_{1\mathbf{k}}\right)^2}, \\
\omega_{2\mathbf{k}} &= \sigma z_1 J_1 \sqrt{\left(C + p(1 - \gamma_{2\mathbf{k}}) + 2A\gamma_{1\mathbf{k}}\right)^2 - \left(2B\gamma_{1\mathbf{k}}\right)^2},
\end{aligned} \tag{2.45}$$

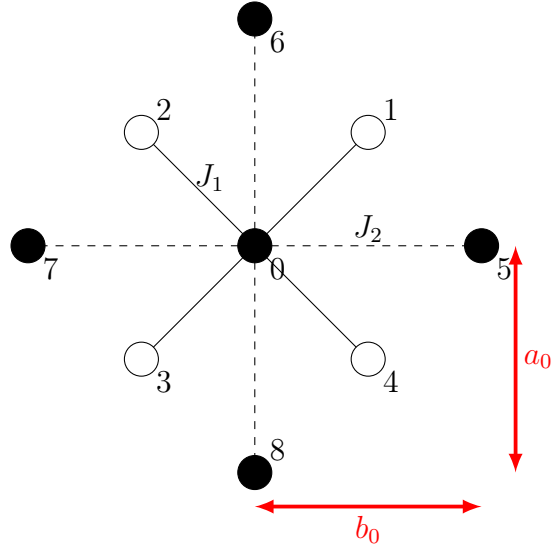
где смо узели у обзир да је $z_1 = z_2 = 4$, $p = \frac{J_2}{J_1}$ и уведене су нове ознаке A , B и C

$$\begin{aligned}
A &= \frac{A'}{J_1} = \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(1 + \alpha) \cos^2 \theta - \frac{d}{4} \sin 2\theta, \\
B &= \frac{B'}{J_1} = \frac{1}{4}(1 + \alpha) \cos^2 \theta + \frac{d}{4} \sin 2\theta, \\
C &= \frac{C'}{J_1} = \alpha - (1 + \alpha) \cos^2 \theta - d \sin 2\theta.
\end{aligned} \tag{2.46}$$

Примећујемо да спектар елементарних побуђења зависи од магнетизације σ , интеракције измене првих J_1 и других J_2 најближих суседа (односно од њиховог односа p), Ђалопински-Морија интеракције и спинске анизотропије као и од таласног вектора $\mathbf{k}$ који фигурише у $\gamma_{i\mathbf{k}}$ ($i = 1, 2$). Израчунајмо сада геометријске факторе $\gamma_{i\mathbf{k}}$, ($i = 1, 2$) одређене изразом

$$\gamma_{i\mathbf{k}} = \frac{1}{z_i} \sum_{\delta_i} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_i}. \tag{2.47}$$

То можемо урадити идентификовањем координата првих и других најближих суседа. Ако посматрамо Сliku 2.5, на којој је представљен уочени спин са својим првим и другим најближим суседима, можемо лако одредити величине $\gamma_{i\mathbf{k}}$.



Слика 2.5: Приказ интеракције спина 0 са својим првим (спинови 1, 2, 3, 4) и другим најближим суседима (спинови 5, 6, 7, 8).

Да бисмо одредили $\gamma_{1\mathbf{k}}$ посматрамо прве најближе суседе одабраном спину (видети Сliku 2.5). Тако добијамо

$$\begin{aligned}
 \gamma_{1\mathbf{k}} &= \frac{1}{z_1} \sum_{\delta_1} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_1} = \frac{1}{4} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot \left(\frac{a_0}{2} \mathbf{e}_x + \frac{b_0}{2} \mathbf{e}_y \right)} + e^{i\mathbf{k} \cdot \left(-\frac{a_0}{2} \mathbf{e}_x + \frac{b_0}{2} \mathbf{e}_y \right)} + e^{i\mathbf{k} \cdot \left(-\frac{a_0}{2} \mathbf{e}_x - \frac{b_0}{2} \mathbf{e}_y \right)} + e^{i\mathbf{k} \cdot \left(\frac{a_0}{2} \mathbf{e}_x - \frac{b_0}{2} \mathbf{e}_y \right)} \right) \\
 &= \frac{1}{4} \left(e^{i\frac{b_0}{2} k_y} + e^{-i\frac{b_0}{2} k_y} \right) \left(e^{i\frac{a_0}{2} k_x} + e^{-i\frac{a_0}{2} k_x} \right) = \cos \frac{a_0}{2} k_x \cos \frac{b_0}{2} k_y.
 \end{aligned} \tag{2.48}$$

Аналогно, посматрајући друге најближе суседе посматраном спину (видети Сliku 2.5) добија се

$$\begin{aligned}
\gamma_{2\mathbf{k}} &= \frac{1}{z_2} \sum_{\delta_2} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_2} = \frac{1}{4} \left(e^{i\mathbf{k} \cdot a_0 \mathbf{e}_x} + e^{-i\mathbf{k} \cdot a_0 \mathbf{e}_x} + e^{i\mathbf{k} \cdot b_0 \mathbf{e}_y} + e^{-i\mathbf{k} \cdot b_0 \mathbf{e}_y} \right) \\
&= \frac{1}{2} (\cos a_0 k_x + \cos b_0 k_y).
\end{aligned} \tag{2.49}$$

Као што видимо из (2.48) и (2.49), оба геометријска фактора зависе од косинуса компонената таласног вектора k_x и k_y . С обзиром да смо нашли експлицитну зависност $\gamma_{i\mathbf{k}}$ ($i = 1, 2$) од импулса, можемо добити спектар елементарних ексцитација када је импулс једнак нули, тј. у центру Брилуенове зоне. У том случају је $\gamma_{1\mathbf{k}=0} = \gamma_{2\mathbf{k}=0} = 1$. Према томе, енергија елементарних ексцитација у центру Брилуенове зоне гласи

$$\begin{aligned}
\omega_{1\mathbf{k}=0} &= \sigma z_1 J_1 \sqrt{\left(C - 2A\right)^2 - \left(2B\right)^2}, \\
\omega_{2\mathbf{k}=0} &= \sigma z_1 J_1 \sqrt{\left(C + 2A\right)^2 - \left(2B\right)^2},
\end{aligned} \tag{2.50}$$

где смо игнорисали експлицитну зависност параметара A , B , C од импулса $\mathbf{k} = 0$, тј. $A_{\mathbf{k}=0} \equiv A$, $B_{\mathbf{k}=0} \equiv B$, $C_{\mathbf{k}=0} \equiv C$. Испитајмо сада граничне случајеве релација (2.50). У случају изотропног модела ($\alpha = 1$) у присуству Ђалошински-Морија интеракције ($d \neq 0$) имамо

$$\begin{aligned}
\tan 2\theta &= d, \\
A &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos^2 \theta - \frac{d}{4} \sin 2\theta, \\
B &= \frac{1}{2} \cos^2 \theta + \frac{d}{4} \sin 2\theta, \\
C &= 1 - 2 \cos^2 \theta - d \sin 2\theta.
\end{aligned} \tag{2.51}$$

На основу (2.51) добијамо

$$\begin{aligned}\frac{\omega_{1\mathbf{k}=0}}{z_1\sigma J_1} &= \sqrt{\left(1 - 2\cos^2\theta - d\sin 2\theta - 1 + \cos^2\theta + \frac{d}{2}\sin 2\theta\right)^2 - 4\left(\frac{1}{2}\cos^2\theta + \frac{d}{4}\sin 2\theta\right)^2} \\ &= 0,\end{aligned}\quad (2.52)$$

$$\begin{aligned}\frac{\omega_{2\mathbf{k}=0}}{z_1\sigma J_1} &= \sqrt{\left(1 - 2\cos^2\theta - d\sin 2\theta + 1 - \cos^2\theta - \frac{d}{2}\sin 2\theta\right)^2 - 4\left(\frac{1}{2}\cos^2\theta + \frac{d}{4}\sin 2\theta\right)^2} \\ &= \sqrt{2}\sqrt{\sin\theta(2d\cos 3\theta + (1+d^2)\sin\theta + (d^2-1)\sin 3\theta)} \neq 0,\end{aligned}\quad (2.53)$$

одакле се види да енергетски геп за дисперзиону релацију $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ не постоји, тј. долази до појаве Голдстоновог мода. У случају анизотропног модела ($\alpha < 1$) без Ђаловински-Морија интеракције ($d = 0$) имамо

$$\begin{aligned}\tan 2\theta &= 0, \\ A &= \frac{1}{2} - \frac{1}{4}(1 + \alpha)\cos^2\theta, \\ B &= \frac{1}{4}(1 + \alpha)\cos^2\theta, \\ C &= \alpha - (1 + \alpha)\cos^2\theta,\end{aligned}\quad (2.54)$$

одакле је

$$\frac{\omega_{1\mathbf{k}=0}}{z_1\sigma J_1} = \sqrt{(1 - \alpha)(1 - \alpha + (1 + \alpha)\cos^2\theta)} = \sqrt{2(1 - \alpha)} \neq 0,\quad (2.55)$$

$$\frac{\omega_{2\mathbf{k}=0}}{z_1\sigma J_1} = \sqrt{(1 + \alpha)\cos 2\theta \sin^2\theta} = 0.\quad (2.56)$$

Видимо да магнонска грана $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ нема геп. Најзад, у случају изотропног модела ($\alpha = 1$) у одсуству Ђаловински-Морија интеракције ($d = 0$) имамо

$$\begin{aligned}
\tan 2\theta &= 0, \\
A &= \frac{1}{2} - \frac{1}{2} \cos^2 \theta = 0, \\
B &= \frac{1}{2} \cos^2 \theta = \frac{1}{2}, \\
C &= -1.
\end{aligned} \tag{2.57}$$

Одавде се види да су гране $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ и $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ без гена, тј.

$$\frac{\omega_{1\mathbf{k}=0}}{z_1 \sigma J_1} = \frac{\omega_{2\mathbf{k}=0}}{z_1 \sigma J_1} = \sqrt{C^2 - 4B^2} = 0. \tag{2.58}$$

2.3 Магнетизација и температура фазног прелаза

Као што је било речи на почетку ове главе, изотропни Хајзенбергов дводимензионални модел не поседује магнетизацију на коначним температурама. Међутим, у присуству спинске анизотропије (означене са α) и Ђаловински-Морија интеракције (означене са $\mathcal{D}$), овај модел поседује магнетизацију у температурском интервалу од нуле до неке максималне температуре, коју називамо Неловом температуром (T_N), на којој магнетизација нестаје. Магнетизацију за подрешетку a дефинишемо као (за спин $S = \frac{1}{2}$)

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle_{\mathbf{k}}. \quad (2.59)$$

Да бисмо одредили магнетизацију, морамо одредити корелациону функцију $\langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle$ (игнорисали смо експлицитну зависност од $\mathbf{k}$). У одељку 2.1 показали смо да корелациону функцију можемо одредити ако нам је познат експлицитни облик Гринева функције. Да бисмо одредили корелациону функцију $\langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle$ потражићемо Гринуву функцију облика $G_{aa}^{+-} = \langle \langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle \rangle$. Након што нађемо експлицитни облик ГФ G_{aa}^{+-} , корелациону функцију $\langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle$ тражићемо као

$$\langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \frac{\langle \langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle \rangle_{\omega+i\epsilon} - \langle \langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle \rangle_{\omega-i\epsilon}}{1 - e^{-\beta\omega}}, \quad (2.60)$$

где смо игнорисали експлицитну зависност од $\mathbf{k}$. Сада можемо наћи потребну корелациону функцију као $\langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle = \langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle - 2\sigma$.

Потребну Гринуву функцију тражимо из система једначина (2.41), где узимамо да је $\hat{\mathcal{B}} = \hat{\sigma}^{-(a)}$. У том случају систем једначина постаје

$$\begin{aligned}
(\omega + Q'_{\mathbf{k}}) G_{aa}^{+-} + 0 \cdot G_{aa}^{--} - P'_{\mathbf{k}} G_{ba}^{+-} - R'_{\mathbf{k}} G_{ba}^{--} &= \frac{i}{\pi} \sigma, \\
0 \cdot G_{aa}^{+-} + (\omega - Q'_{\mathbf{k}}) G_{aa}^{--} + R'_{\mathbf{k}} G_{ba}^{+-} + P'_{\mathbf{k}} G_{ba}^{--} &= 0, \\
-P'_{\mathbf{k}} G_{aa}^{+-} - R'_{\mathbf{k}} G_{aa}^{--} + (\omega + Q'_{\mathbf{k}}) G_{ba}^{+-} + 0 \cdot G_{ba}^{--} &= 0, \\
R'_{\mathbf{k}} G_{aa}^{+-} + P'_{\mathbf{k}} G_{aa}^{--} + 0 \cdot G_{ba}^{+-} + (\omega - Q'_{\mathbf{k}}) G_{ba}^{--} &= 0,
\end{aligned} \tag{2.61}$$

где су $G_{aa}^{+-} = \langle\langle \hat{\sigma}^{+(a)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle\rangle$, $G_{aa}^{--} = \langle\langle \hat{\sigma}^{-(a)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle\rangle$, $G_{ba}^{+-} = \langle\langle \hat{\sigma}^{+(b)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle\rangle$, $G_{ba}^{--} = \langle\langle \hat{\sigma}^{-(b)} | \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle\rangle$. У првој једначини система, са десне стране једнакости имамо $\langle[\hat{\sigma}^{+(a)}, \hat{\sigma}^{-(a)}]\rangle = 2\langle\hat{\sigma}^{z(a)}\rangle = 2\sigma$, док је у свим осталим случајевима тај комутор једнак нули. Овај систем једначина решавамо Крамеровим правилом, према којем је

$$\begin{aligned}
G_{aa}^{+-} &= \frac{D_{G_{aa}^{+-}}}{D_S}, & G_{aa}^{--} &= \frac{D_{G_{aa}^{--}}}{D_S}, \\
G_{ba}^{+-} &= \frac{D_{G_{ba}^{+-}}}{D_S}, & G_{ba}^{--} &= \frac{D_{G_{ba}^{--}}}{D_S},
\end{aligned} \tag{2.62}$$

где је детерминанта система D_S дата са (2.42), а детерминанте $D_{G_{aa}^{+-}}$, $D_{G_{aa}^{--}}$, $D_{G_{ba}^{+-}}$, $D_{G_{ba}^{--}}$ гласе

$$D_{G_{aa}^{+-}} = \begin{vmatrix} \frac{i}{\pi} \sigma & 0 & -P'_{\mathbf{k}} & -R'_{\mathbf{k}} \\ 0 & \omega - Q'_{\mathbf{k}} & R'_{\mathbf{k}} & P'_{\mathbf{k}} \\ 0 & -R'_{\mathbf{k}} & \omega + Q'_{\mathbf{k}} & 0 \\ 0 & P'_{\mathbf{k}} & 0 & \omega - Q'_{\mathbf{k}} \end{vmatrix}, \tag{2.63}$$

$$D_{G_{aa}^{--}} = \begin{vmatrix} \omega + Q'_k & \frac{i}{\pi}\sigma & -P'_k & -R'_k \\ 0 & 0 & R'_k & P'_k \\ -P'_k & 0 & \omega + Q'_k & 0 \\ R'_k & 0 & 0 & \omega - Q'_k \end{vmatrix}, \quad (2.64)$$

$$D_{G_{ba}^{+-}} = \begin{vmatrix} \omega + Q'_k & 0 & \frac{i}{\pi}\sigma & -R'_k \\ 0 & \omega - Q'_k & 0 & P'_k \\ -P'_k & -R'_k & 0 & 0 \\ R'_k & P'_k & 0 & \omega - Q'_k \end{vmatrix}, \quad (2.65)$$

$$D_{G_{ba}^{--}} = \begin{vmatrix} \omega + Q'_k & 0 & -P'_k & \frac{i}{\pi}\sigma \\ 0 & \omega - Q'_k & R'_k & 0 \\ -P'_k & -R'_k & \omega + Q'_k & 0 \\ R'_k & P'_k & 0 & 0 \\ \cdot & & & \end{vmatrix}. \quad (2.66)$$

С обизорм да је за рачунање магнетизације потребна једино $\Gamma\Phi G_{aa}^{+-}$, посматраћемо детерминанту $D_{G_{aa}^{+-}}$, дату изразом (2.63). Одговарајућа Гринова функција је тада

$$G_{aa}^{+-} = \frac{D_{G_{aa}^{+-}}}{D_S}. \quad (2.67)$$

Након рачунања детерминанти добијамо да је Гринова функција G_{aa}^{+-}

$$G_{aa}^{+-} = \frac{i\sigma \omega^3 - \omega^2 Q'_k + \omega (R_k'^2 - Q_k'^2 - P_k'^2) - Q'_k R_k'^2 - Q'_k P_k'^2 + Q_k'^3}{\pi \left(\omega^2 - \omega_{1k}^2 \right) \left(\omega^2 - \omega_{2k}^2 \right)}. \quad (2.68)$$

На основу израза за корелациону функцију (2.60) видимо да је потребно да у $\Gamma\Phi$ уместо ω убацимо $\omega \pm i\epsilon$. С обзиром на облик $\Gamma\Phi$ (2.68), убацивање $\omega \rightarrow \omega \pm i\epsilon$ би дало веома компликован резултат. Да би се олакшало даље рачунање, израз (2.68) ћемо свести на облик

$$G_{aa}^{+-} = \sum_{\eta} \frac{A_{\eta}}{\omega - \omega_{\eta}}. \quad (2.69)$$

Да бисмо то урадили, потребно је најпре да детерминанту система D_S сведемо на производ величина првог степена по ω и $\omega_{1/2k}$ као

$$D_S = \left(\omega^2 - \omega_{1k}^2 \right) \left(\omega^2 - \omega_{2k}^2 \right) = (\omega - \omega_{1k})(\omega + \omega_{1k})(\omega - \omega_{2k})(\omega + \omega_{2k}). \quad (2.70)$$

Тада је

$$\begin{aligned} G_{aa}^{+-} &= \frac{i\sigma \omega^3 - \omega^2 Q'_k + \omega (R_k'^2 - Q_k'^2 - P_k'^2) - Q'_k R_k'^2 - Q'_k P_k'^2 + Q_k'^3}{\pi \left(\omega^2 - \omega_{1k}^2 \right) \left(\omega^2 - \omega_{2k}^2 \right)} \\ &= \frac{A_1}{\omega - \omega_{1k}} + \frac{A_2}{\omega + \omega_{1k}} + \frac{A_3}{\omega - \omega_{2k}} + \frac{A_4}{\omega + \omega_{2k}}, \end{aligned} \quad (2.71)$$

где је потребно одредити величине A_1, A_2, A_3, A_4 . Погодним трансформацијама десне стране једначине (2.71), а затим изједначавањем коефицијената уз $\omega^3, \omega^2, \omega^1, \omega^0$ добијамо систем једначина

$$\begin{aligned}
A_1 + A_2 + A_3 + A_4 &= 1, \\
A_1\omega_{1\mathbf{k}} - A_2\omega_{1\mathbf{k}} + A_3\omega_{2\mathbf{k}} - A_4\omega_{2\mathbf{k}} &= -Q'_{\mathbf{k}}, \\
-A_1\omega_{2\mathbf{k}}^2 - A_2\omega_{2\mathbf{k}} - A_3\omega_{1\mathbf{k}}^2 - A_4\omega_{1\mathbf{k}}^2 &= R_{\mathbf{k}}'^2 - Q_{\mathbf{k}}'^2 - P_{\mathbf{k}}'^2, \\
-A_1\omega_{1\mathbf{k}}\omega_{2\mathbf{k}}^2 + A_2\omega_{1\mathbf{k}}\omega_{2\mathbf{k}}^2 - A_3\omega_{1\mathbf{k}}^2\omega_{2\mathbf{k}} + A_4\omega_{1\mathbf{k}}^2\omega_{2\mathbf{k}} &= -Q'_{\mathbf{k}}R_{\mathbf{k}}'^2 + Q_{\mathbf{k}}'^3 - P_{\mathbf{k}}'^2Q'_{\mathbf{k}}.
\end{aligned} \tag{2.72}$$

Решавањем овог система добијамо

$$\begin{aligned}
A_1 &= \frac{P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}} + \omega_{1\mathbf{k}}}{4\omega_{1\mathbf{k}}}, \quad A_2 = \frac{-P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}} + \omega_{1\mathbf{k}}}{4\omega_{1\mathbf{k}}}, \\
A_3 &= \frac{-P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}}}{4\omega_{2\mathbf{k}}}, \quad A_4 = \frac{P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}} + \omega_{2\mathbf{k}}}{4\omega_{2\mathbf{k}}}.
\end{aligned} \tag{2.73}$$

Када смо исписали Гринову функцију у облику (2.71), можемо одредити корелациону функцију (2.60) користећи релацију $\frac{1}{x \pm i\epsilon} = P\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$. Тада је

$$\begin{aligned}
\langle\langle\hat{\sigma}^{+(a)}|\hat{\sigma}^{-(a)}\rangle\rangle_{\omega+i\epsilon} &= \frac{i\sigma}{\pi} \left[P\frac{A_1}{\omega - \omega_{1\mathbf{k}}} - i\pi\delta(\omega - \omega_{1\mathbf{k}})A_1 + P\frac{A_2}{\omega + \omega_{1\mathbf{k}}} - i\pi\delta(\omega + \omega_{1\mathbf{k}})A_2 \right. \\
&\quad \left. + P\frac{A_3}{\omega - \omega_{2\mathbf{k}}} - i\pi\delta(\omega - \omega_{2\mathbf{k}})A_3 + P\frac{A_4}{\omega + \omega_{2\mathbf{k}}} - i\pi\delta(\omega + \omega_{2\mathbf{k}})A_4 \right],
\end{aligned} \tag{2.74}$$

$$\begin{aligned}
\langle\langle\hat{\sigma}^{+(a)}|\hat{\sigma}^{-(a)}\rangle\rangle_{\omega-i\epsilon} &= \frac{i\sigma}{\pi} \left[P\frac{A_1}{\omega - \omega_{1\mathbf{k}}} + i\pi\delta(\omega - \omega_{1\mathbf{k}})A_1 + P\frac{A_2}{\omega + \omega_{1\mathbf{k}}} + i\pi\delta(\omega + \omega_{1\mathbf{k}})A_2 \right. \\
&\quad \left. + P\frac{A_3}{\omega - \omega_{2\mathbf{k}}} + i\pi\delta(\omega - \omega_{2\mathbf{k}})A_3 + P\frac{A_4}{\omega + \omega_{2\mathbf{k}}} + i\pi\delta(\omega + \omega_{2\mathbf{k}})A_4 \right].
\end{aligned} \tag{2.75}$$

Ако изразе (2.74) и (2.75) уврстимо у (2.60) и ослободимо се интеграла уз помоћ Диракових делта функција добијамо корелациону функцију

$$\langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle = 2\sigma \left[\frac{A_1}{1 - e^{-\beta\omega_{1\mathbf{k}}}} + \frac{A_2}{1 - e^{\beta\omega_{1\mathbf{k}}}} + \frac{A_3}{1 - e^{-\beta\omega_{2\mathbf{k}}}} + \frac{A_4}{1 - e^{\beta\omega_{2\mathbf{k}}}} \right]. \quad (2.76)$$

Користећи релације

$$\begin{aligned} \frac{A_1}{1 - e^{-\beta\omega_{1\mathbf{k}}}} + \frac{A_2}{1 - e^{\beta\omega_{1\mathbf{k}}}} &= \frac{A_1 \left(1 - e^{\beta\omega_{1\mathbf{k}}} \right) + A_2 \left(1 - e^{-\beta\omega_{1\mathbf{k}}} \right)}{\left(1 - e^{-\beta\omega_{1\mathbf{k}}} \right) \left(1 - e^{\beta\omega_{1\mathbf{k}}} \right)}, \\ \frac{A_3}{1 - e^{-\beta\omega_{2\mathbf{k}}}} + \frac{A_4}{1 - e^{\beta\omega_{2\mathbf{k}}}} &= \frac{A_3 \left(1 - e^{\beta\omega_{2\mathbf{k}}} \right) + A_4 \left(1 - e^{-\beta\omega_{2\mathbf{k}}} \right)}{\left(1 - e^{-\beta\omega_{2\mathbf{k}}} \right) \left(1 - e^{\beta\omega_{2\mathbf{k}}} \right)}, \end{aligned} \quad (2.77)$$

експлицитне изразе за A_1, A_2, A_3, A_4 дате у (2.73), као и тригонометријске идентитете

$$\begin{aligned} 2 \cosh x &= e^x + e^{-x}, \\ 2 \sinh x &= e^x - e^{-x}, \\ \coth x &= \frac{e^x + e^{-x}}{e^x - e^{-x}}, \end{aligned} \quad (2.78)$$

долазимо до коначног облика корелационе функције $\langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle$ који гласи

$$\begin{aligned} \langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle &= 2\sigma \left[\frac{(P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}}) \coth \frac{\beta\omega_{1\mathbf{k}}}{2}}{4\omega_{1\mathbf{k}}} + \frac{1}{4} + \frac{1}{4} - \frac{(P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}}) \coth \frac{\beta\omega_{2\mathbf{k}}}{4}}{2\omega_{2\mathbf{k}}} \right] \\ &= \sigma \left[1 + \frac{(P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}}) \coth \frac{\beta\omega_{1\mathbf{k}}}{2}}{2\omega_{1\mathbf{k}}} - \frac{(P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}}) \coth \frac{\beta\omega_{2\mathbf{k}}}{2}}{2\omega_{2\mathbf{k}}} \right]. \end{aligned} \quad (2.79)$$

С обзиром да магнетизација зависи од корелационе функције $\langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle$, морамо са корелационе функције дате изразом (2.79) прећи на тражену. Тај прелаз се врши уз помоћ комутационих релација за спинске операторе, тј. $[\hat{\sigma}^{+(a)}, \hat{\sigma}^{-(a)}] = \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} - \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} = 2\hat{\sigma}^z(a)$. Када израз (2.79) уврстимо у $\langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle = \langle \hat{\sigma}^{+(a)} \hat{\sigma}^{-(a)} \rangle - 2\sigma$ добијамо

$$\langle \hat{\sigma}^{-(a)} \hat{\sigma}^{+(a)} \rangle = -\sigma + \sigma \left[\frac{(P'_k - Q'_k) \coth \frac{\beta \omega_{1k}}{2}}{2\omega_{1k}} - \frac{(P'_k + Q'_k) \coth \frac{\beta \omega_{2k}}{2}}{2\omega_{2k}} \right]. \quad (2.80)$$

Користећи ову корелациону функцију добијамо

$$\sigma = \frac{1}{2} - \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left(-\sigma + \sigma \left[\frac{(P'_k - Q'_k) \coth \frac{\beta \omega_{1k}}{2}}{2\omega_{1k}} - \frac{(P'_k + Q'_k) \coth \frac{\beta \omega_{2k}}{2}}{2\omega_{2k}} \right] \right), \quad (2.81)$$

одакле добијамо следећи израз за магнетизацију дводимензионалног фрустрираног Хајзенберговог модела са спинском анизотропијом и Ђалошински-Морија интеракцијом

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{(P'_k - Q'_k) \coth \frac{\beta \omega_{1k}}{2}}{\omega_{1k}} - \frac{(P'_k + Q'_k) \coth \frac{\beta \omega_{2k}}{2}}{\omega_{2k}} \right), \quad (2.82)$$

где су величине P'_k и Q'_k дате релацијама (2.40), а величине ω_{1k} и ω_{2k} релацијама (2.44).

Примећујемо да магнетизација дата изразом (2.82), поред интеракција измене, спинске анизотропије и Ђалошински-Морија интеракције, зависи и од температуре. Као што је познато, магнетизација има ненулту вредност све до температуре $T = T_N$ [6]. Ову температуру можемо одредити из (2.82) користећи развој за мале вредности аргумента (односно високе температуре)

$$\coth \frac{\omega_{1/2k}}{2} \approx \frac{2}{\beta \omega_{1/2k}} + \frac{\beta \omega_{1/2k}}{6}. \quad (2.83)$$

Израз (2.82) постаје

$$\begin{aligned} \frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{P'_{\mathbf{k}}}{\omega_{1\mathbf{k}}} \left(\frac{2}{\beta\omega_{1\mathbf{k}}} + \frac{\beta\omega_{1\mathbf{k}}}{6} \right) - \frac{Q'_{\mathbf{k}}}{\omega_{1\mathbf{k}}} \left(\frac{2}{\beta\omega_{1\mathbf{k}}} + \frac{\beta\omega_{1\mathbf{k}}}{6} \right) - \frac{P'_{\mathbf{k}}}{\omega_{2\mathbf{k}}} \left(\frac{2}{\beta\omega_{2\mathbf{k}}} + \frac{\beta\omega_{2\mathbf{k}}}{6} \right) \right. \\ \left. - \frac{Q'_{\mathbf{k}}}{\omega_{2\mathbf{k}}} \left(\frac{2}{\beta\omega_{2\mathbf{k}}} + \frac{\beta\omega_{2\mathbf{k}}}{6} \right) \right). \end{aligned} \quad (2.84)$$

Када у изразу (2.84) групишемо исте чланове добијамо

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{2}{\beta} \left(\frac{P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}}}{\omega_{1\mathbf{k}}^2} - \frac{P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}}}{\omega_{2\mathbf{k}}^2} \right) - \frac{Q'_{\mathbf{k}}\beta}{3} \right). \quad (2.85)$$

Множењем израза (2.85) са $\frac{\beta\sigma}{2}$ добијамо

$$\frac{\beta}{2} = \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \left(\sigma \left(\frac{P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}}}{\omega_{1\mathbf{k}}^2} - \frac{P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}}}{\omega_{2\mathbf{k}}^2} \right) - \frac{Q'_{\mathbf{k}}\beta^2\sigma}{6} \right). \quad (2.86)$$

С обзиром да величине $P'_{\mathbf{k}}$, $Q'_{\mathbf{k}}$ и $\omega_{1/2\mathbf{k}}$ (дате изразима (2.40)) и (2.45)) зависе од магнетизације σ , користећи релације

$$\begin{aligned} P'_{\mathbf{k}} &= P_{\mathbf{k}}\sigma, \\ Q'_{\mathbf{k}} &= Q_{\mathbf{k}}\sigma, \\ \omega_{1/2\mathbf{k}} &= \Omega_{1/2\mathbf{k}}\sigma \end{aligned} \quad (2.87)$$

и узимајући да је $\lim_{T \rightarrow T_N} \lim \sigma = 0$ добијамо Нелову температуру

$$\beta_N = \frac{1}{k_B T_N} = \frac{2}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{P_{\mathbf{k}} - Q_{\mathbf{k}}}{\Omega_{1\mathbf{k}}^2} - \frac{P_{\mathbf{k}} + Q_{\mathbf{k}}}{\Omega_{2\mathbf{k}}^2} \right). \quad (2.88)$$

Користећи изразе (2.82) и (2.88) можемо одредити критични експонент β_{cr} . Када у (2.85) уврстимо (2.87) добијамо

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{2}{\sigma\beta} \left(\frac{P_{\mathbf{k}} - Q_{\mathbf{k}}}{\Omega_{1\mathbf{k}}^2} - \frac{P_{\mathbf{k}} + Q_{\mathbf{k}}}{\Omega_{2\mathbf{k}}^2} \right) - \frac{Q_{\mathbf{k}}\sigma\beta}{3} \right). \quad (2.89)$$

Користећи израз (2.88), онда (2.89) постаје

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{\beta_N}{\beta\sigma} - \frac{2}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{Q_{\mathbf{k}}\sigma\beta}{3}. \quad (2.90)$$

Након сређивања, претходни израз постаје

$$\sigma = \sqrt{\frac{1}{-\frac{2}{N_A} \sum_{\mathbf{k}} \frac{Q_{\mathbf{k}}\beta}{3}} \left(1 - \frac{\beta_N}{\beta} \right)} \approx \sqrt{1 - \frac{\theta}{\theta_N}}, \quad (2.91)$$

где је $\theta = k_B T = \frac{1}{\beta}$. Одавде се види да је критични експонент $\beta_{cr} = \frac{1}{2}$, што је познати класични резултат [7].

3 Анализа резултата добијених за спектар елементарних ексцитација и магнетизацију

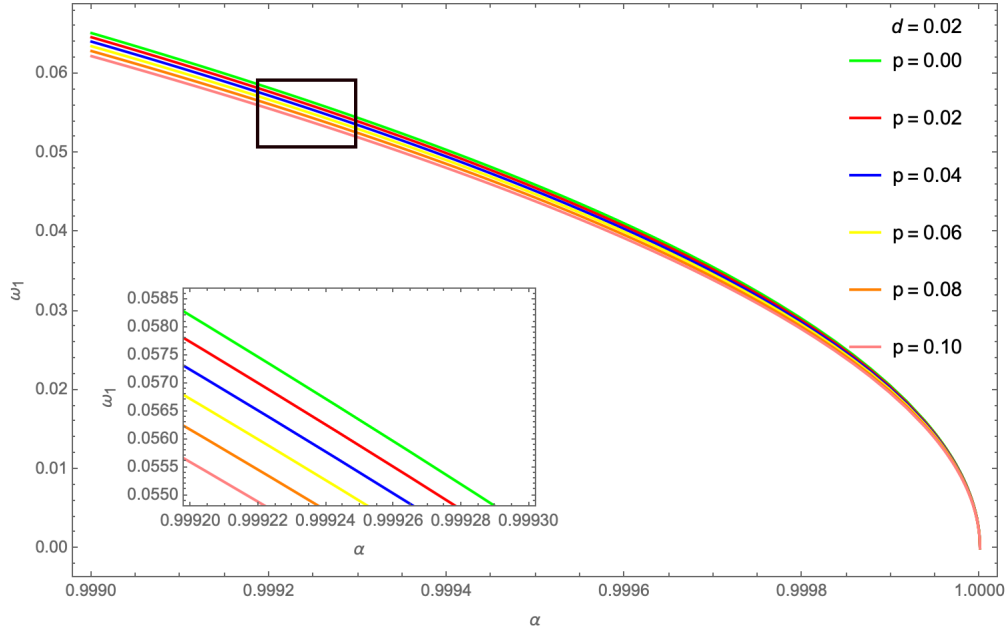
У прошлој глави извели смо експлицитне изразе за спектре елементарних ексцитација (2.45), магнетизацију (2.82) и Нелову температуру (2.88). Ове величине зависе од фрустрационог параметра p , анизотропије α , Ђалошински-Морија интеракције d и температуре T . С обзиром на то, сада можемо испитати како се дисперзиона релација, магнетизација и Нелова температура понашају у зависности од ових параметара.

3.1 Анализа резултата за спектар елементарних ексцитација

Посматрајмо најпре понашање спектра елементарних ексцитација у центру Брилуенове зоне ($\mathbf{k} = 0$) на температури $T = 0$. Тада изрази (2.50) постају

$$\begin{aligned}\omega_{1\mathbf{k}=0} &= \sigma_0 z_1 J_1 \sqrt{\left(C - 2A\right)^2 - \left(2B\right)^2}, \\ \omega_{2\mathbf{k}=0} &= \sigma_0 z_1 J_1 \sqrt{\left(C + 2A\right)^2 - \left(2B\right)^2}.\end{aligned}\tag{3.1}$$

Магнетизацију на апсолутној нули σ_0 одређујемо користећи израз (2.82), у коме котангенс хиперболични апроксимирамо јединицом, тј. $\coth \frac{\beta\omega_{1/2\mathbf{k}}}{2} \approx 1$. Узимајући ово у обзир могуће је испитати спектар елементарних ексцитација (2.50) при промени анизотропије α , Ђалошински-Морија интеракције d и фрустрационог параметра p . Вредности које се користе за параметре d и p у наставку су вредности које се често користе [14]. Најпре ћемо приказати (Слика 3.1) спектар елементарних ексцитација у центру Брилуенове зоне $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ у зависности од анизотропије α , узимајући у обзир да је анизотропија мала, тј. да је α блиско јединици. Са Слике 3.1 примећујемо да геп $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ иде ка нули за дату вредност параметра p , али опада како расте p , што указује да за изотропни модел ($\alpha = 1$) долази до појаве Голдстоновог мода. Уједно је на тој слици (као и на већини слика које следе) један део кривих приказан увећан да би се лакше могле уочити мале промене гепа при промени параметра p . Ситуација је аналогна и при промени параметра d , али сада $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ расте са порастом d . Ово је приказано на Слици 3.2.

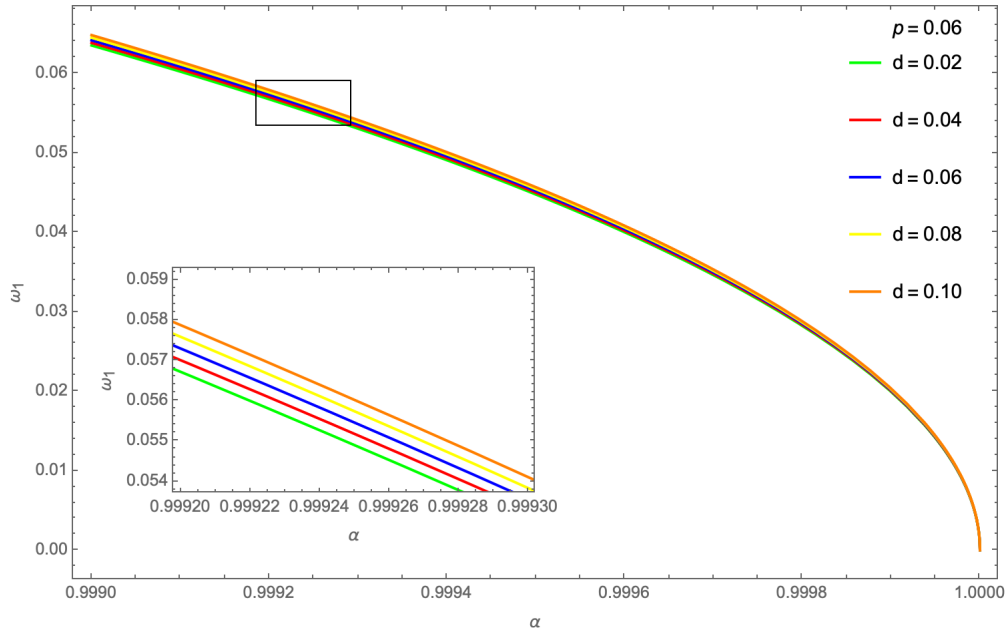


Слика 3.1: Горња слика представља зависност $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1\mathbf{k}=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од α од параметра p . Доња слика представља увећан означен део горње слике.

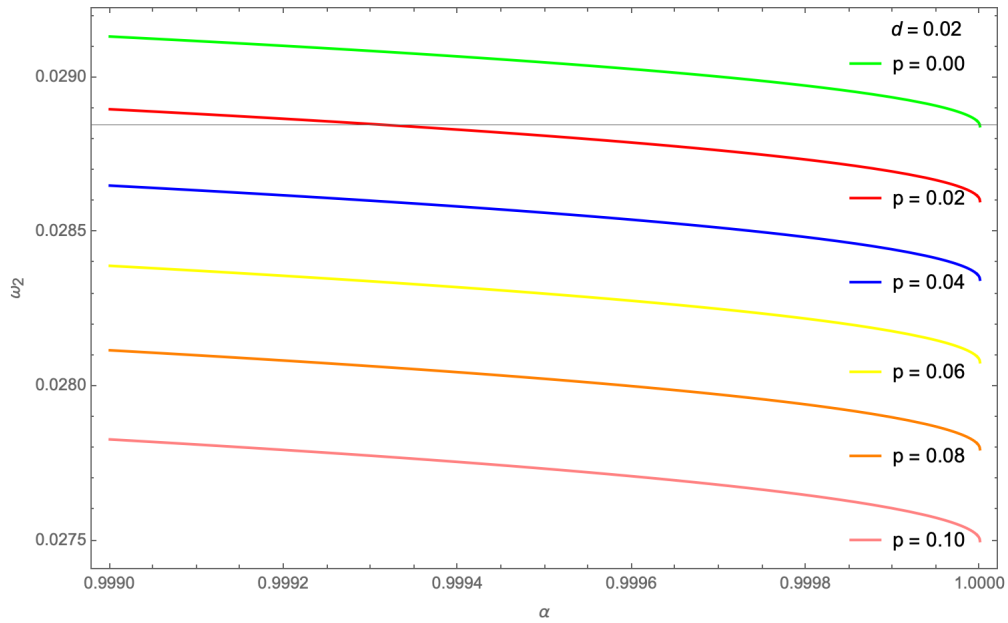
Ситуација је другачија када се посматра магнонска грана $\omega_{2\mathbf{k}=0}$. На Слици 3.3 примећујемо да $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ слабо опада са порастом параметра α и опада са порастом параметра p . На Слици 3.4 је приказана зависност магнонске гране $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ од α и d . Закључујемо да $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ практично не зависи од параметра α и да расте са порастом параметра d .

Сада прелазимо на испитивање зависности спектра елементарних ексцитација у центру Брилуенове зоне од Ђалопшински-Морија интеракције d . Посматрајући Сlike 3.5 и 3.6 може се уочити да магнонска грана $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ слабо расте са порастом параметра d , а опада како расту параметари p и α . Магнонска грана $\omega_{2\mathbf{k}=0}$, која је приказана на Сликама 3.7 и 3.8, расте са порастом параметра d , а опада како расту параметри p и α . У одсуству Ђалопшински-Морија интеракције, тј. када је $d = 0$, магнонска грана тежи нули што указује да долази до појаве Голдстоновог мода.

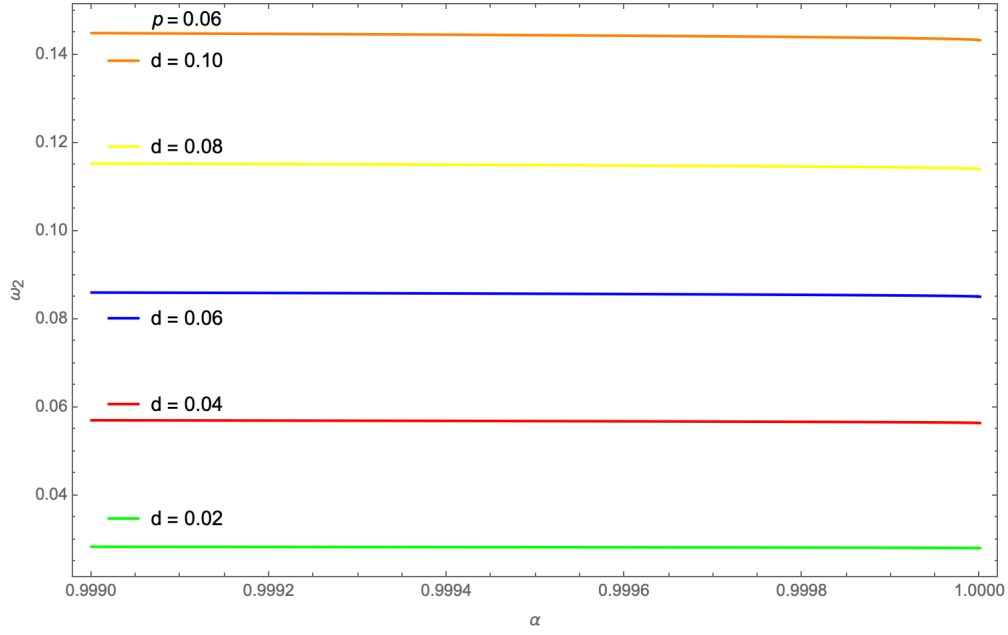
На крају, испитајмо зависност магнонских енергија од параметра p .



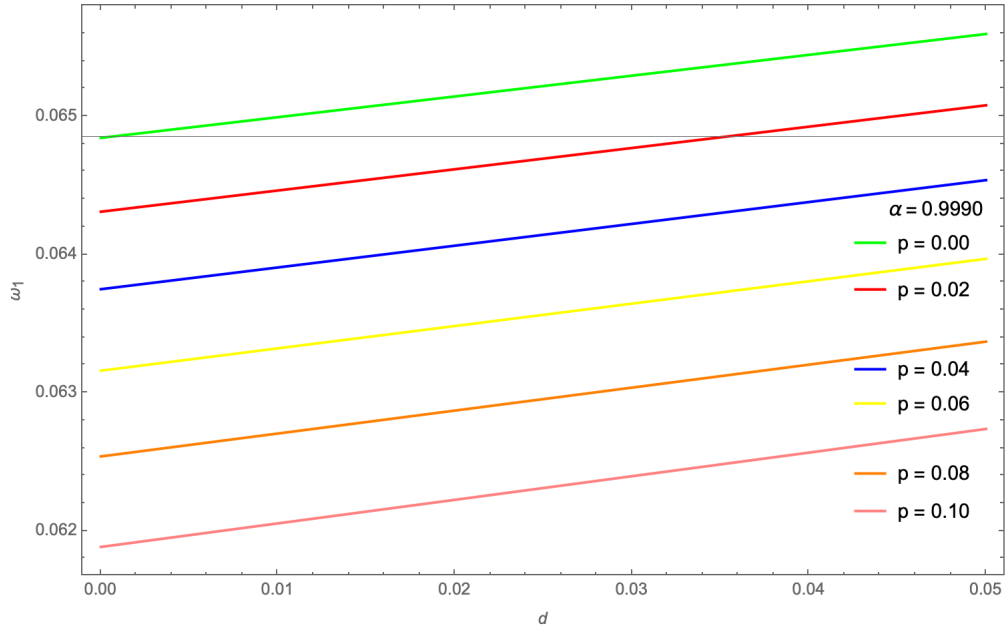
Слика 3.2: Горња слика представља зависност $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1k=0}}{J_1}$ на $T = 0$ K од α од параметра d . Доња слика представља увећан уоквирен део горње слике.



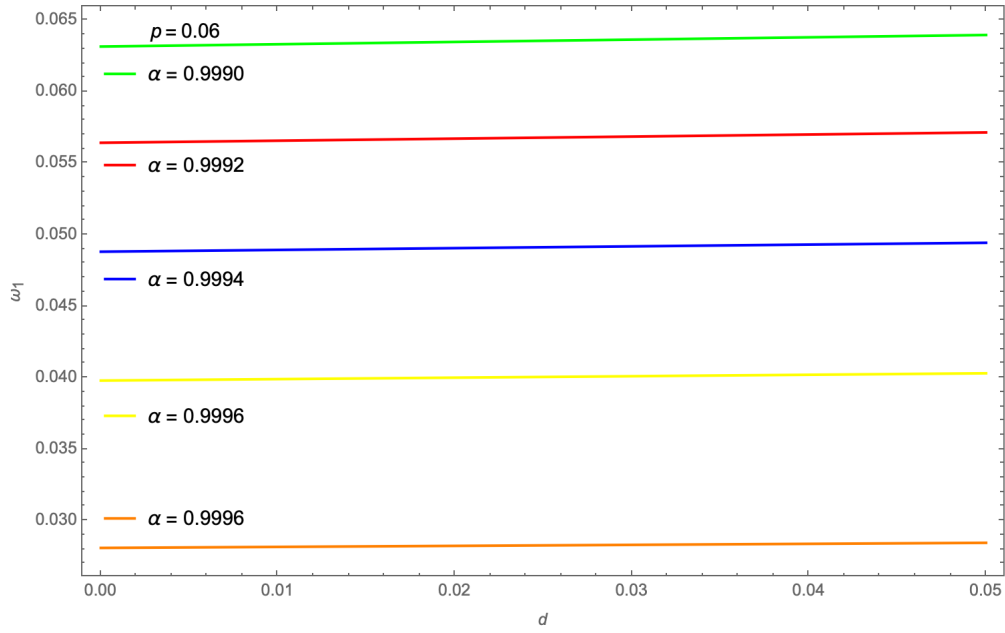
Слика 3.3: Зависност $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2k=0}}{J_1}$ на $T = 0$ K од α од параметра p .



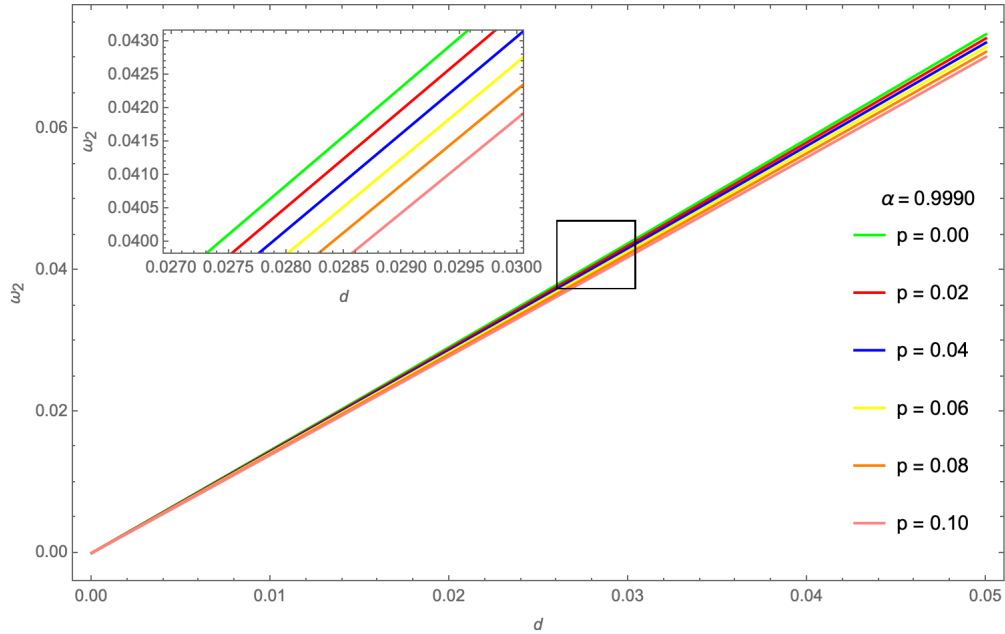
Слика 3.4: Зависност $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од α од параметра d .



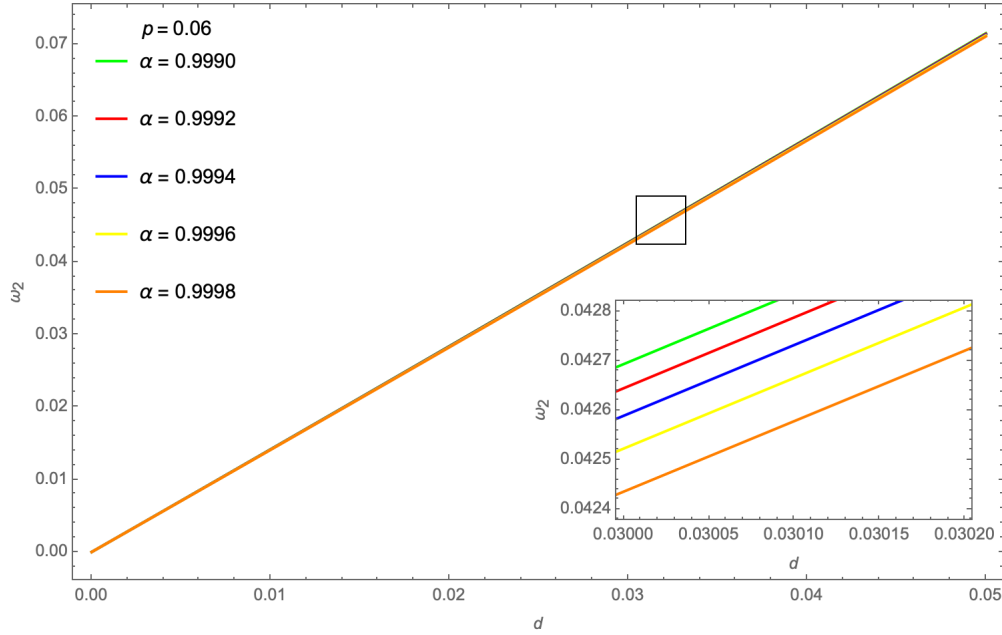
Слика 3.5: Зависност $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од d од параметра p .



Слика 3.6: Зависност $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од d од параметра α .

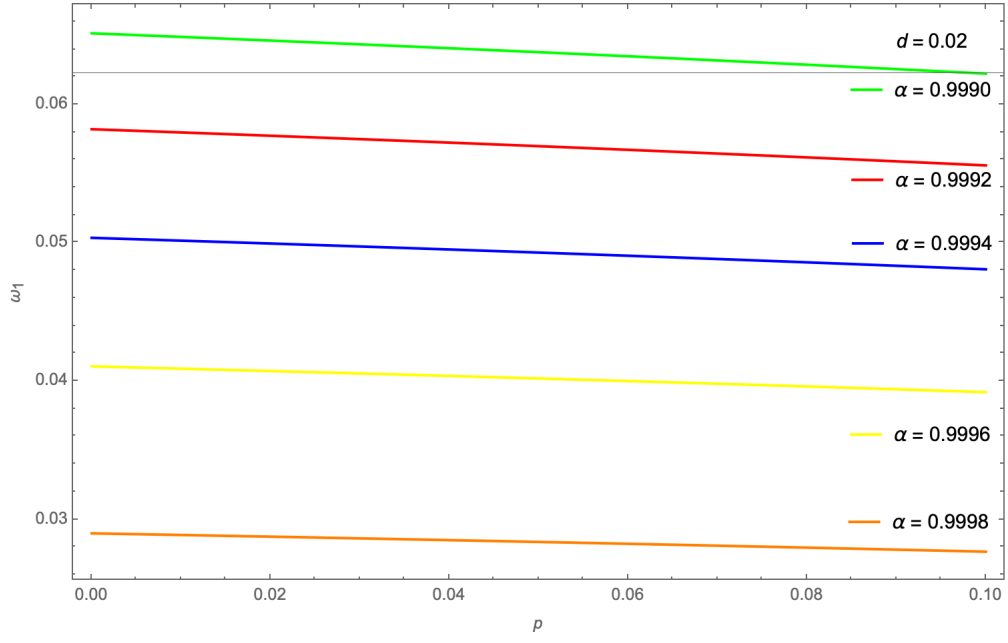


Слика 3.7: Горња слика представља зависност $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од d од параметра p . Горња слика представља увећан уоквирен део доње слике.

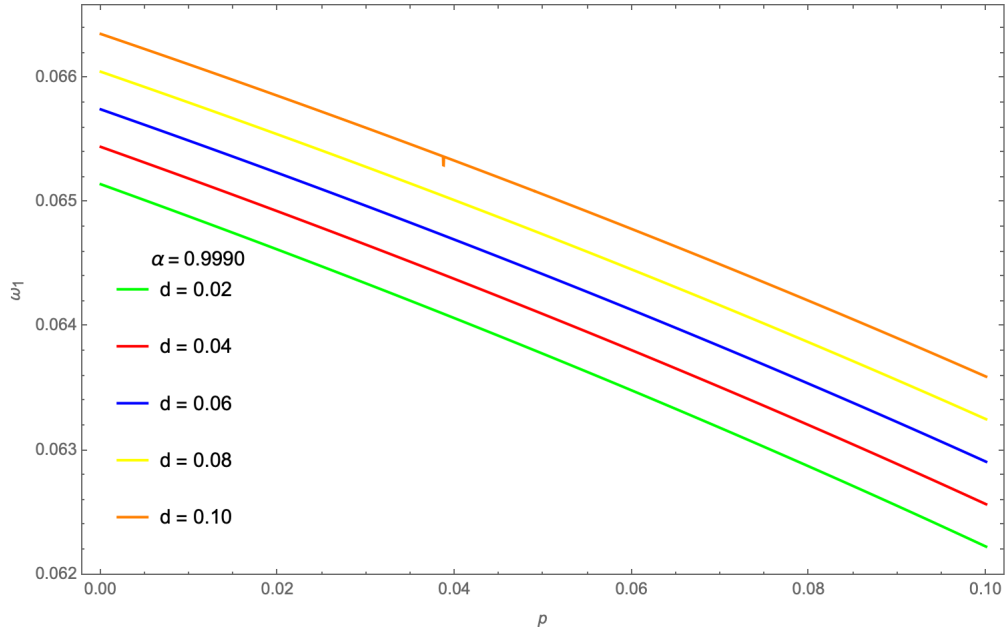


Слика 3.8: Горња слика представља зависност $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од d од параметра α . Доња слика представља увећан уоквирен део горње слике.

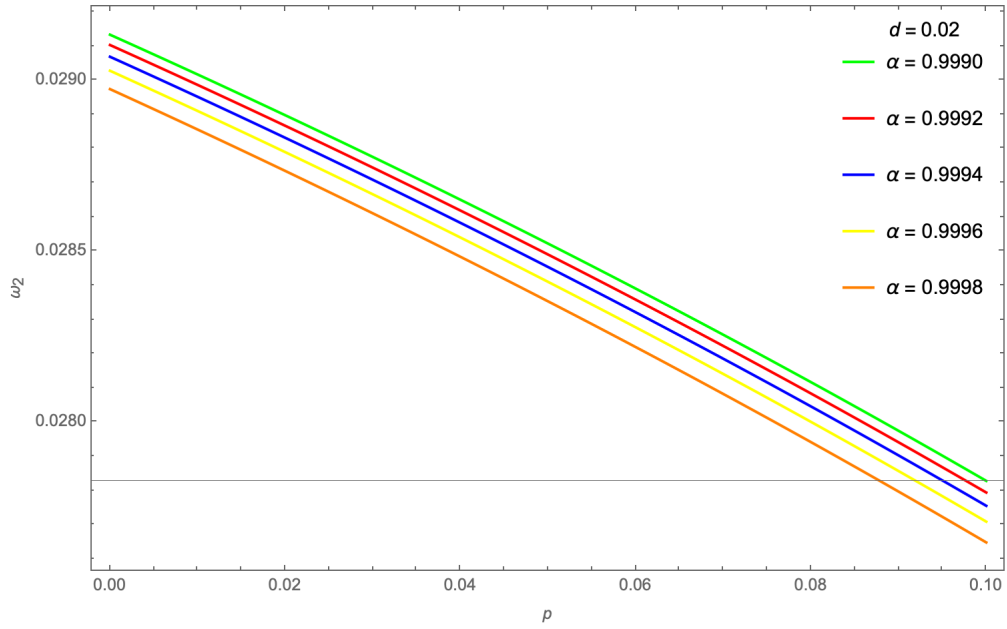
Видимо да магнонска грана $\omega_{1k=0}$, која је дата на Сликама 3.9 и 3.10, слабо опада са порастом параметра p при промени параметара α и d . У случају гране $\omega_{2k=0}$, која је приказана на Сликама 3.11 и 3.12, закључујемо да са порастом параметра p , магнонска енергија незнатно опада. Овакво понашање магнонских енергија последица је чињенице да са порастом параметра p расте интеракција измене других најближих суседа J_2 која разуређује систем што доводи до смањења енергетског гена.



Слика 3.9: Зависност $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од p од параметра α .

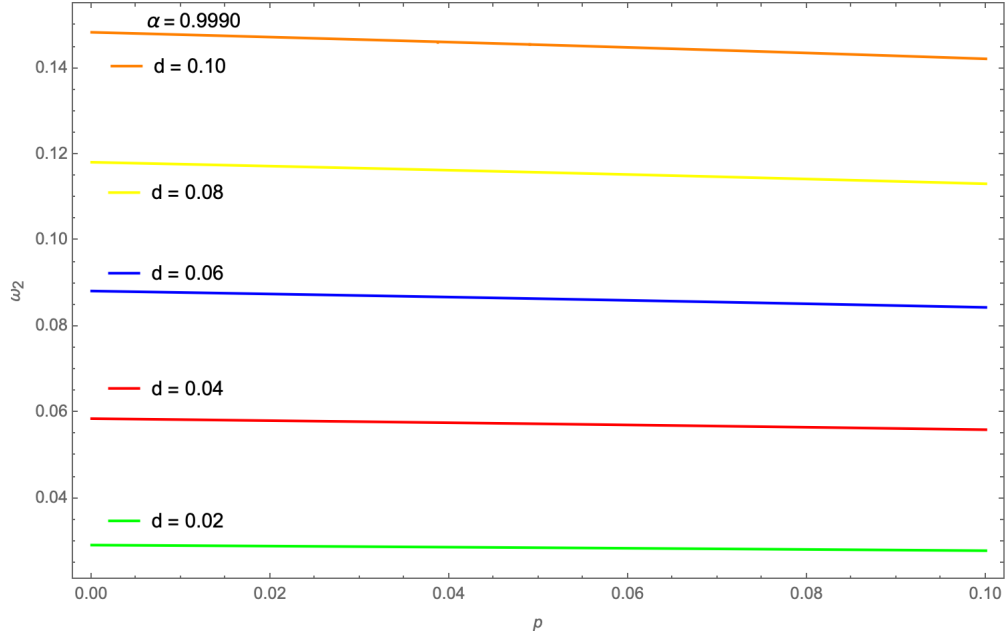


Слика 3.10: Зависност $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1k=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од p од параметра d .

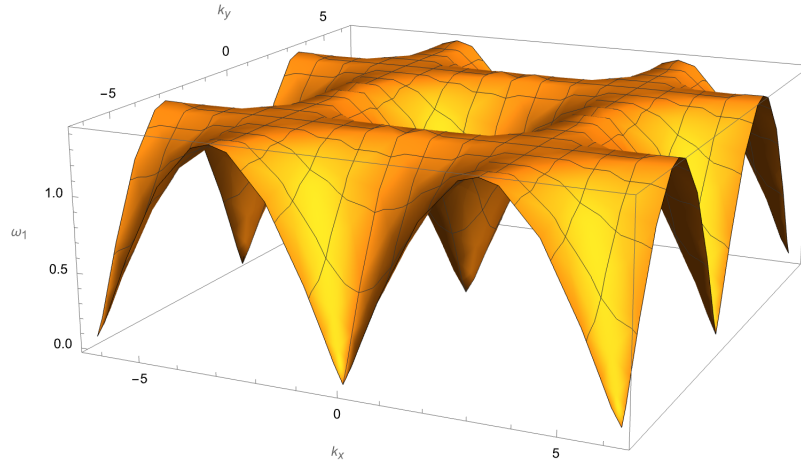


Слика 3.11: Зависност $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2\mathbf{k}=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од p од параметра α .

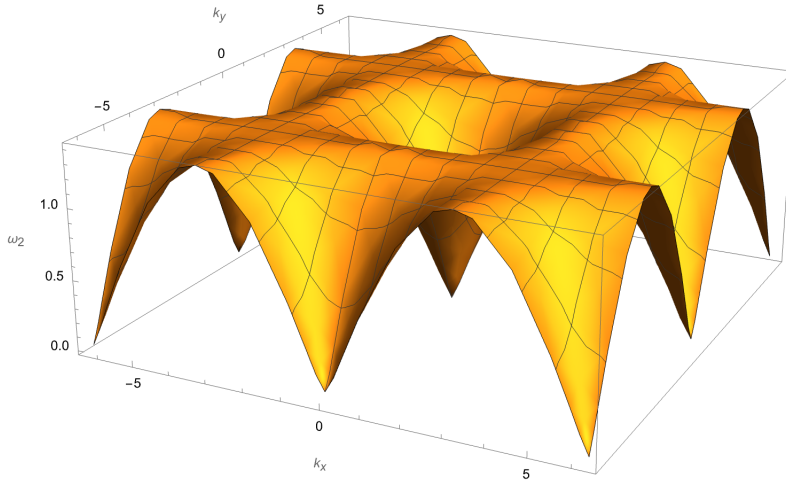
На крају, погледаћемо зависност спектра елементарних ексцитација датог изразима (2.45) од таласних вектора k_x и k_y , за одређен скуп вредности параметара p , α и d . Ово је дато на Сликама 3.13 и 3.14. Примећујемо да за одређене вредности таласних вектора магнонска енергија постаје једнака нули.



Слика 3.12: Зависност $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2\mathbf{k}=0}}{J_1}$ на $T = 0\text{K}$ од p од параметра d .



Слика 3.13: Зависност спектра $\omega_1 \equiv \frac{\omega_{1\mathbf{k}}}{J_1}$ од таласних вектора $k_x \in [-2\pi, 2\pi]$ и $k_y \in [-2\pi, 2\pi]$ за $p = 0.02$, $d = 0.02$, $\alpha = 0.9990$.



Слика 3.14: Зависност спектра $\omega_2 \equiv \frac{\omega_{2\mathbf{k}}}{J_1}$ од таласних вектора $k_x \in [-2\pi, 2\pi]$ и $k_y \in [-2\pi, 2\pi]$ за $p = 0.02$, $d = 0.02$ и $\alpha = 0.9990$.

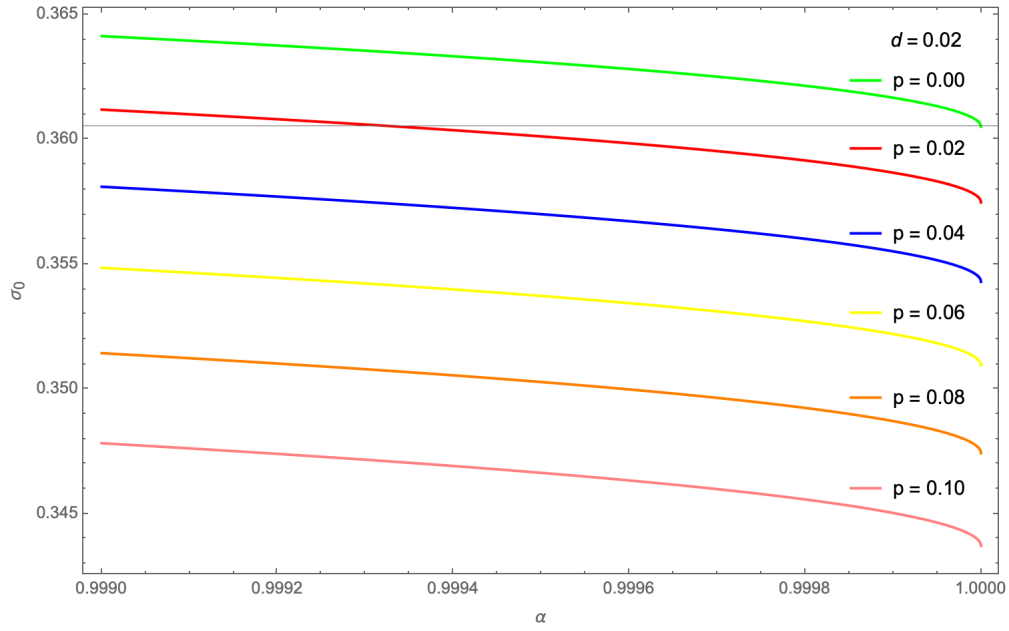
3.2 Анализа резултата за магнетизацију

У овом одељку посматраћемо зависност спонтане магнетизације дате изразом (2.82) од анизотропије α , Ђаловински-Морија интеракције d и фрустрационог параметра p на $T = 0\text{K}$ и за $T \neq 0$. Посматрајмо магнетизацију на $T = 0\text{K}$. У том случају се, као што је већ речено, котангенс хиперболични може апроксимирати јединицом те (2.82) постаје

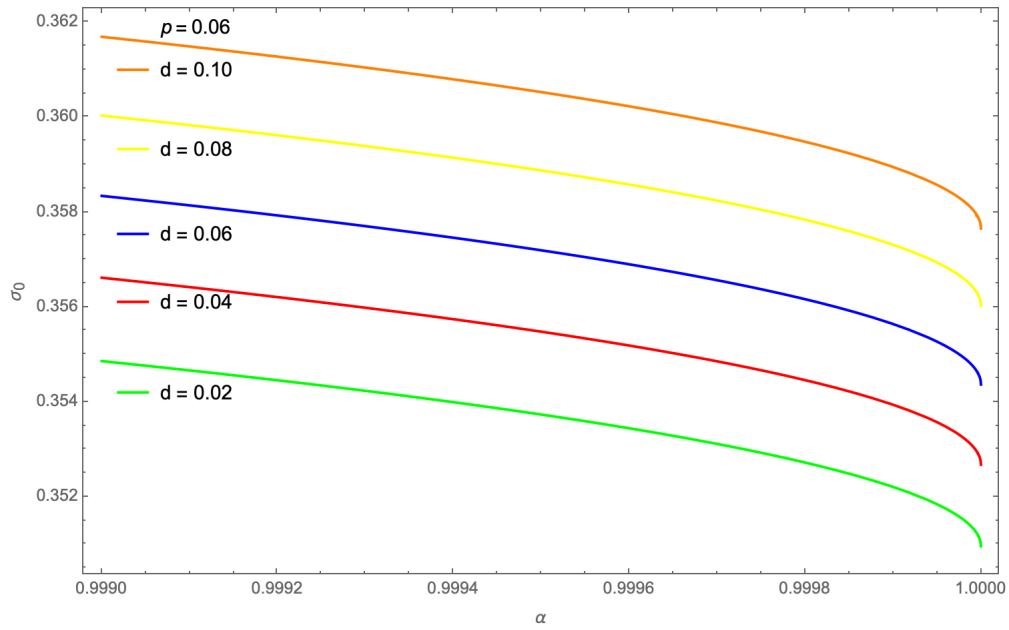
$$\frac{1}{\sigma_0} = \frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{(P'_{\mathbf{k}} - Q'_{\mathbf{k}})}{\omega_{1\mathbf{k}}} - \frac{(P'_{\mathbf{k}} + Q'_{\mathbf{k}})}{\omega_{2\mathbf{k}}} \right), \quad (3.2)$$

где су $P'_{\mathbf{k}}$ и $Q'_{\mathbf{k}}$ дати изразима (2.49), а $\omega_{1\mathbf{k}}$ и $\omega_{2\mathbf{k}}$ изразима (2.50), у којима треба ставити да је $\sigma = \sigma_0$.

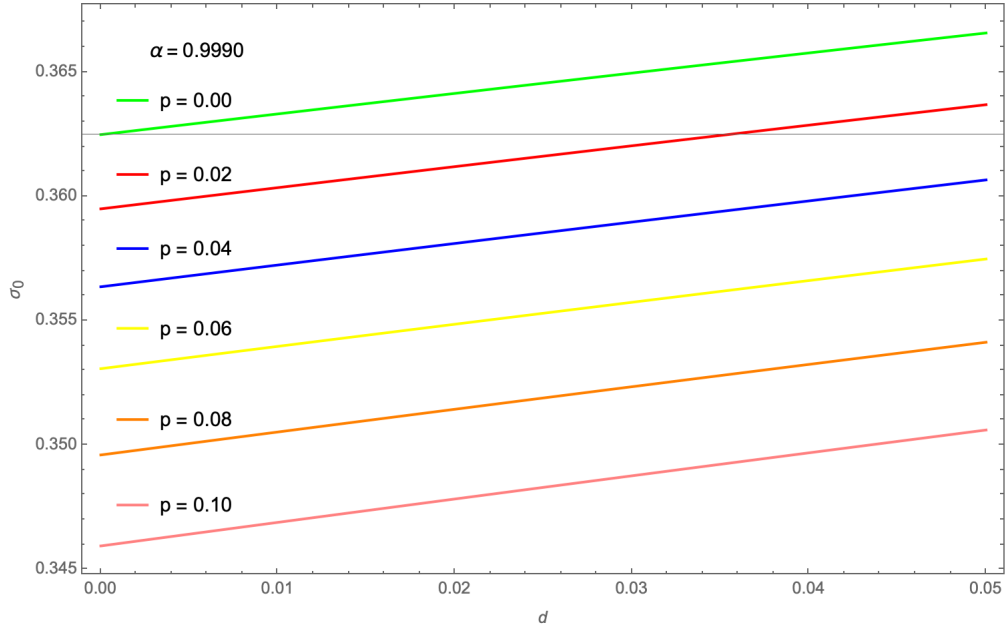
Са Слика 3.15–3.20 види се да магнетизација на $T = 0\text{K}$ слабо зависи од наведених параметара. Такође, запажамо да пораст параметра d води ка повећавању σ_0 , док пораст параметара p и α доводе до смањења σ_0 . Вредности фрустрационог параметра, које смо до сада посматрали, лежале су у интервалу од 0 до 0.1. Ако сада посматрамо зависност магнетизације од p , где је



Слика 3.15: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од α од параметра p .



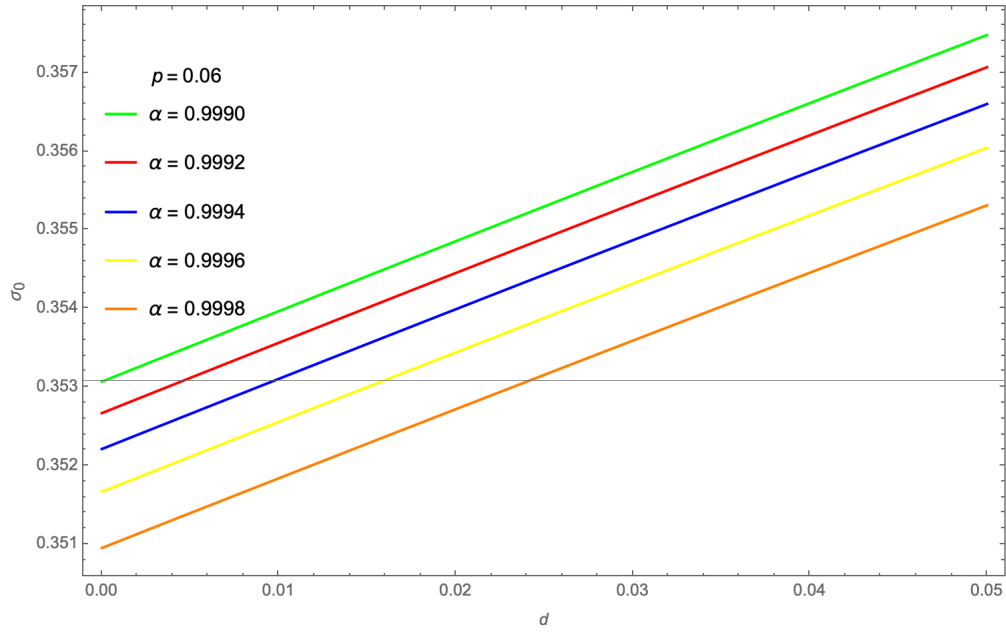
Слика 3.16: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од α од параметра d .



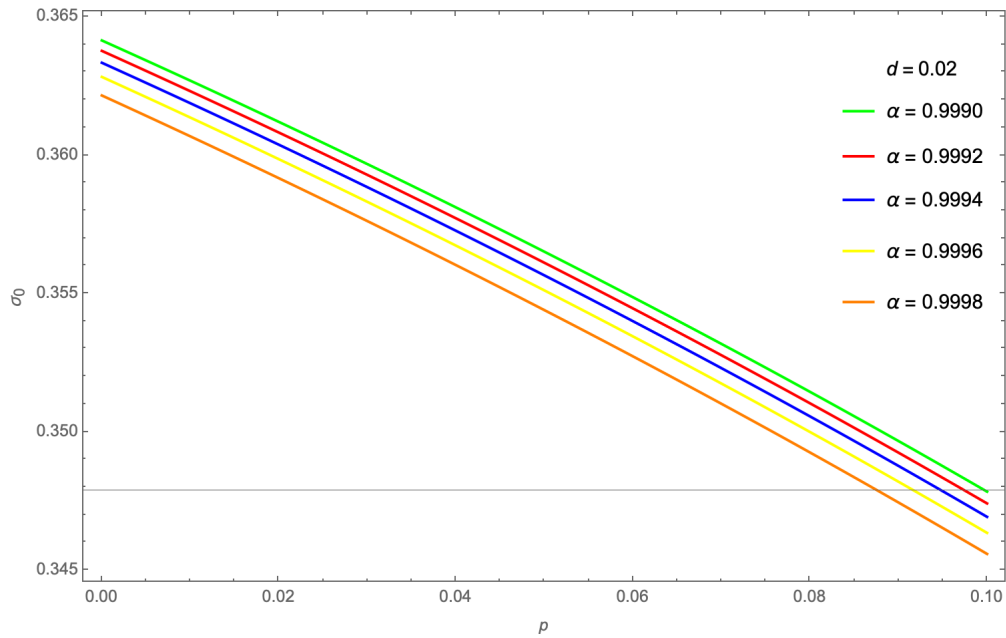
Слика 3.17: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од d од параметра p .

$p \in [0, 1]$, што је представљено на Сликама 3.21 и 3.22, примећујемо да магнетизација постоји до $p \approx 0.5$. Ово се објашњава тиме да са порастом параметра p расте интеракције измене других најближих суседа J_2 што доводи до разуређења спинова, услед чега долази до преласка из антиферромагнетног у неуређено (парамагнетно) стање.

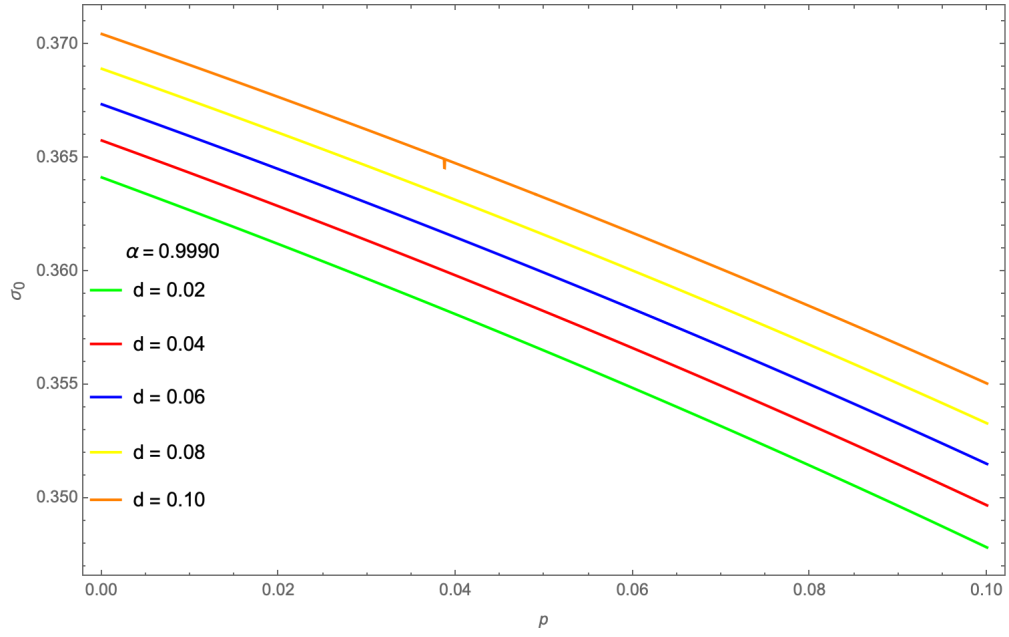
Посматрајмо сада зависност спонтане магнетизације (2.82) од температуре, при промени параметра α , d и p . С обзиром да је магнетизација задата имплицитно, нумеричка интеграција се ради итеративним поступком. Узимамо да је вредност интеракције измене првих најближих суседа једнака $J_1 = 100\text{meV}$. На Слици 3.23 је приказана зависност магнетизације од температуре при промени анизотропије, где примећујемо да Нелова температура опада како расте α , што говори да се фазни прелаз дешава на све нижим температурама. У случају промене параметра d видимо да Нелова температура расте како расте d , што је приказано на Слици 3.24. Са Сlike 3.25 видимо да Нелова температура опада са порастом параметра p .



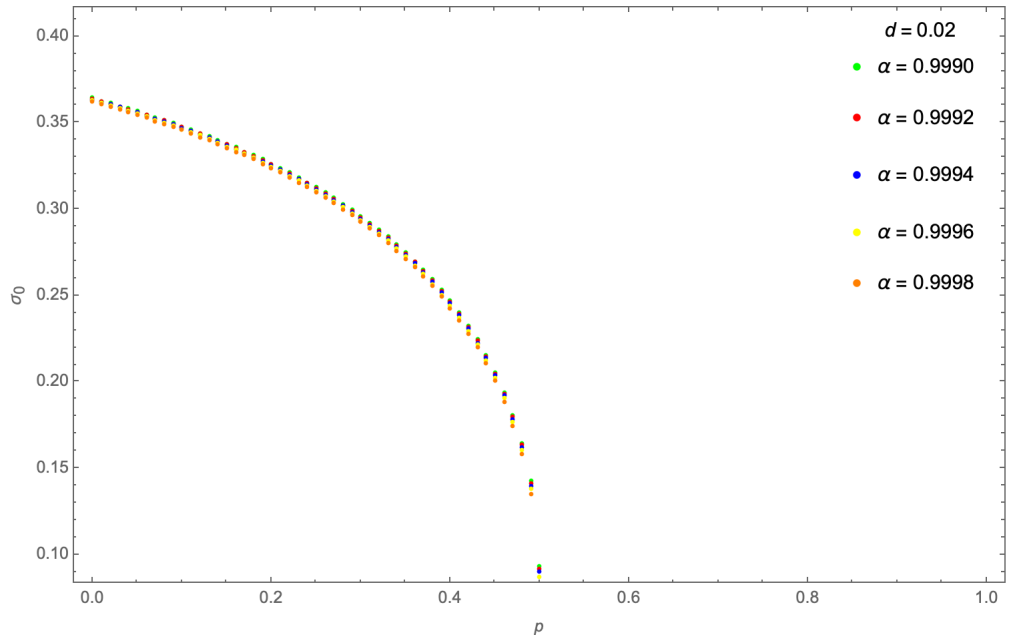
Слика 3.18: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од d од параметра α .



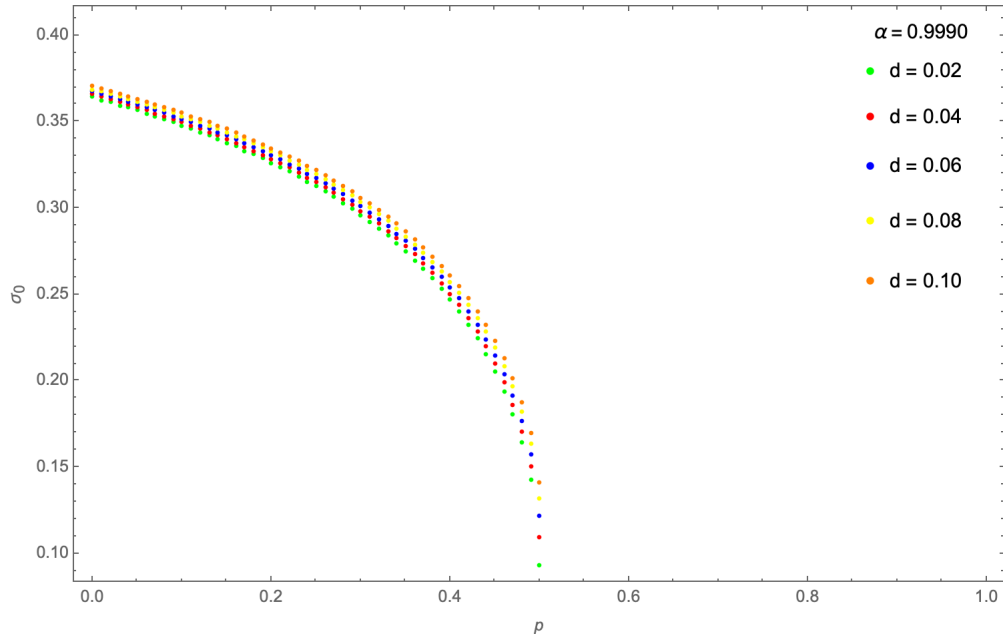
Слика 3.19: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од p од параметра α .



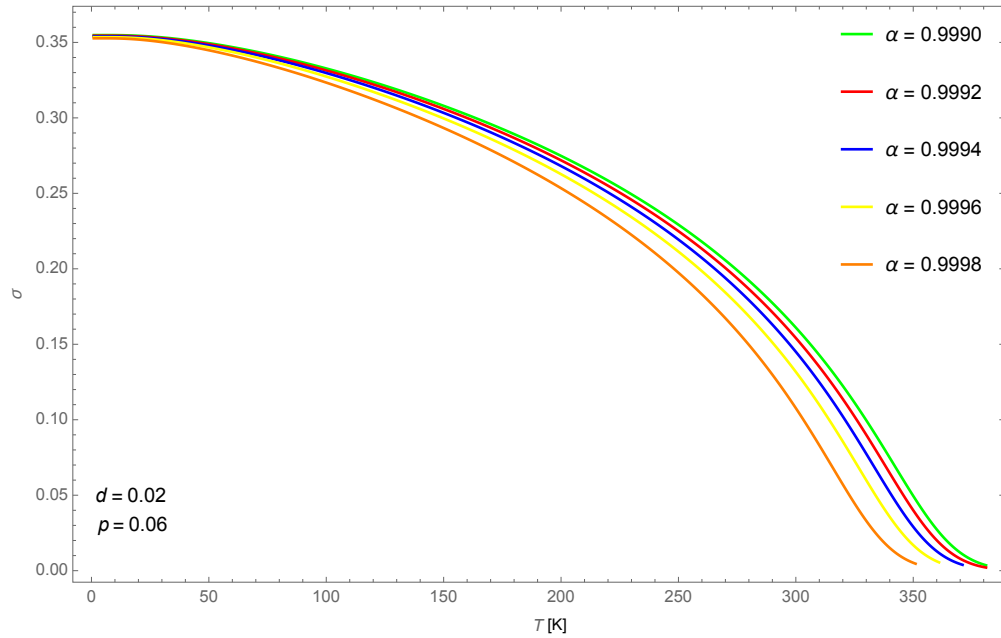
Слика 3.20: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од p од параметра d .



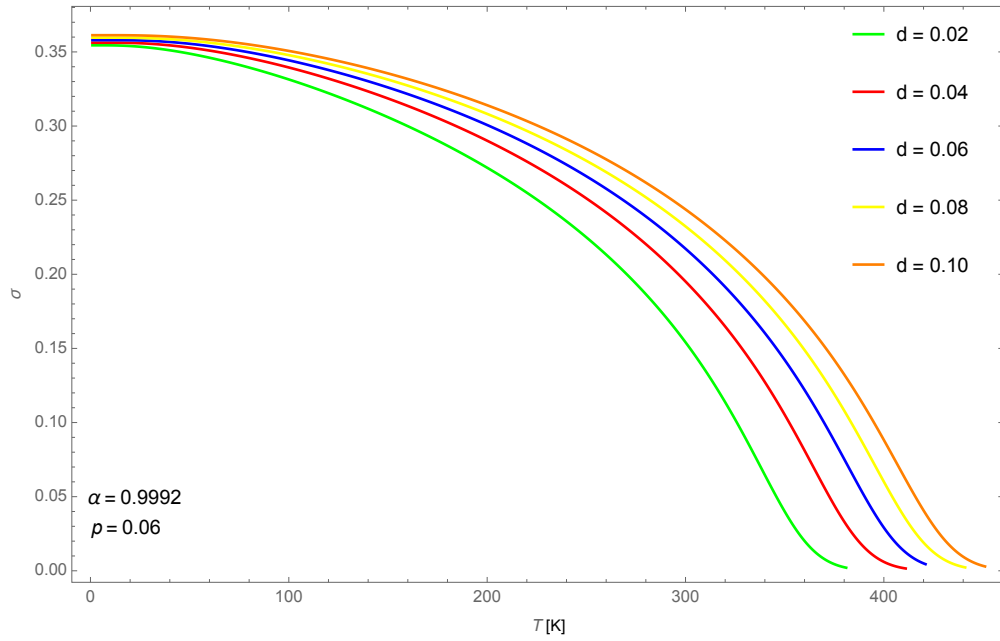
Слика 3.21: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од p од параметра α .



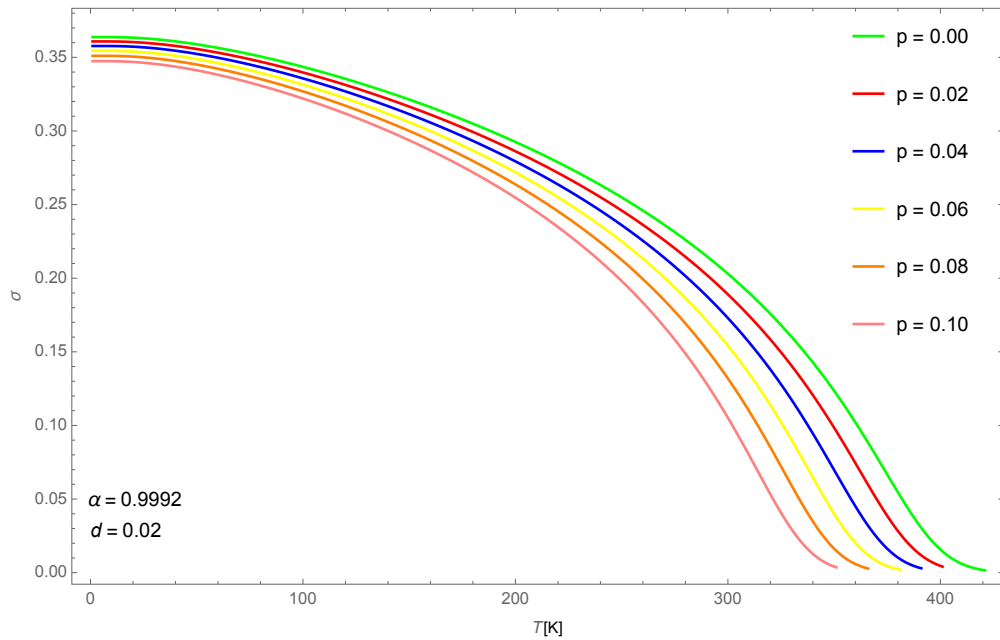
Слика 3.22: Зависност магнетизације σ_0 на $T = 0\text{K}$ од p од параметра d .



Слика 3.23: Зависност магнетизације σ од T [K] од параметра α .



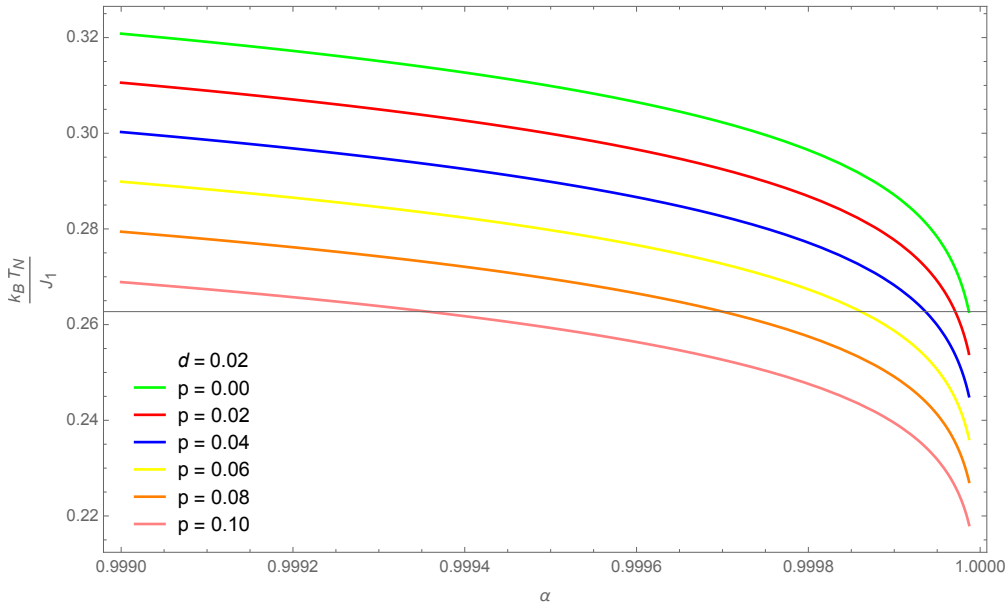
Слика 3.24: Зависност магнетизације σ од T [K] од параметра d .



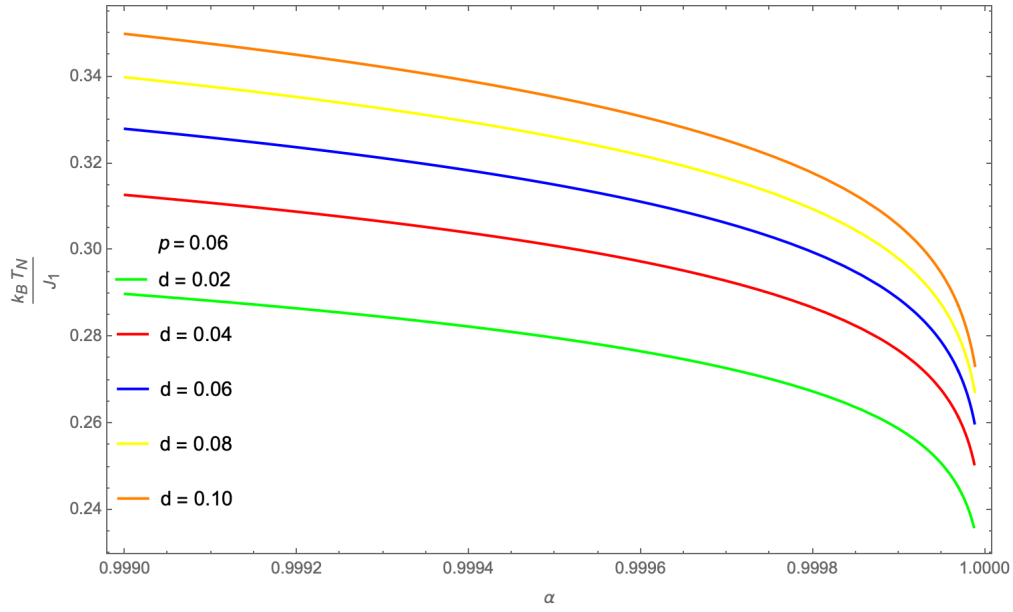
Слика 3.25: Зависност магнетизације σ од T [K] од параметра p .

3.3 Анализа резултата за Нелову температуру

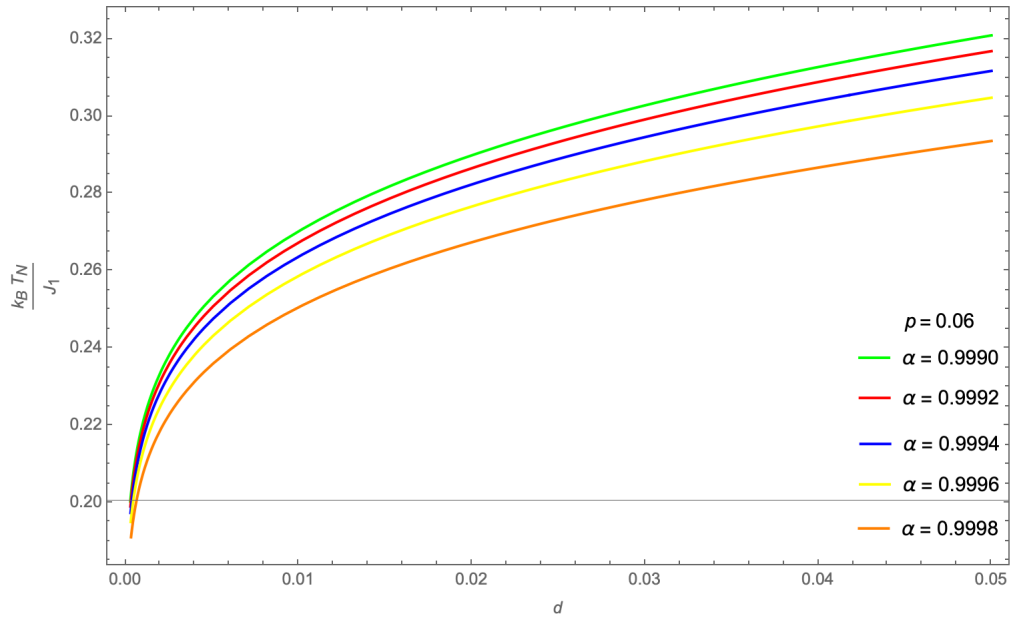
Аналогно горе наведеним поступцима, посматрамо зависност Нелове температуре (2.88) од параметара α , d и p . На Сликама 3.26 и 3.27 дата је зависност Нелове температуре од параметра α при промени параметара p и d респективно. Примећујемо да Нелова температура опада са порастом p , а расте са порастом d (и практично не зависи од α). На Сликама 3.28 и 3.29 је приказана зависност Нелове температуре од параметра d при промени параметара α и p . На обе слике примећујемо да T_N расте како расте d , али опада са порастом α и p . На крају, посматрајмо како се мења T_N у зависности од параметра p , што је приказано на Сликама 3.30 и 3.31. Примећујемо да критична температура опада са порастом параметра p , опада са порастом α , а расте са порастом d . У случају да посматрамо шири опсег фрустрационог параметра ($p \in [0, 1]$), што је приказано на Слици 3.32, закључујемо да Нелова температура опада до $T_N = 0\text{K}$ за фрустрациони параметар $p \approx 0.5$. С обзиром да је температура прелаза $T_N = 0\text{K}$ то значи да тада постоји квантни фазни прелаз [15]. За вредности фрустрационог параметра $p \approx 0.5$ систем престаје да буде уређен и прелази у парамагнетно (неуређено) стање и с обзиром да смо израз за критичну температуру (2.88) добили коришћењем хамилтонијана који описује Нелову фазу, модел не може да израчуна критичну температуру за интервал фрустрационг параметера $0.5 < p < 1$.



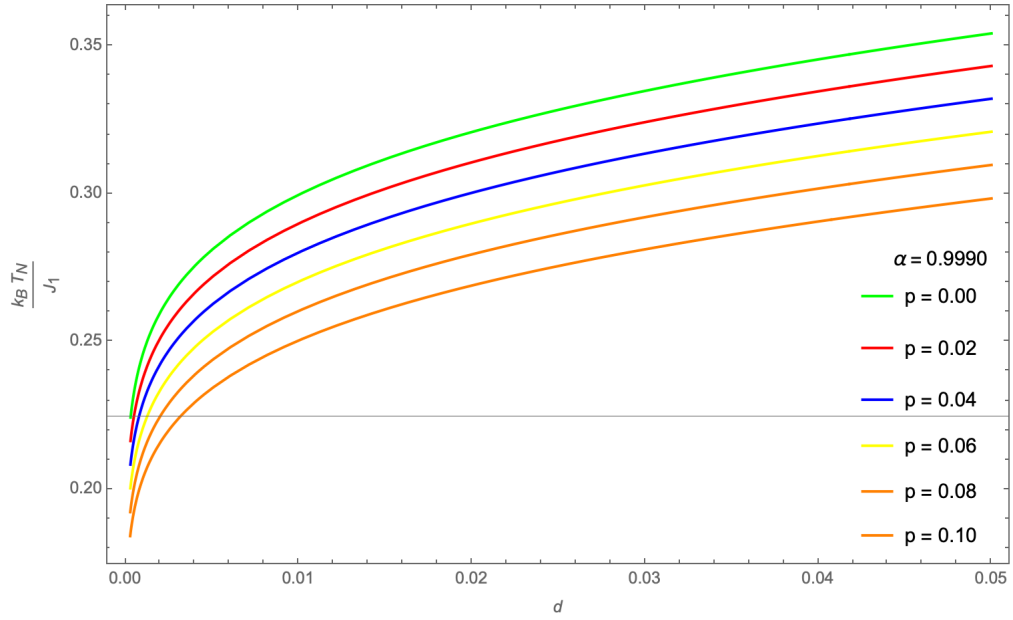
Слика 3.26: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од α од параметра p .



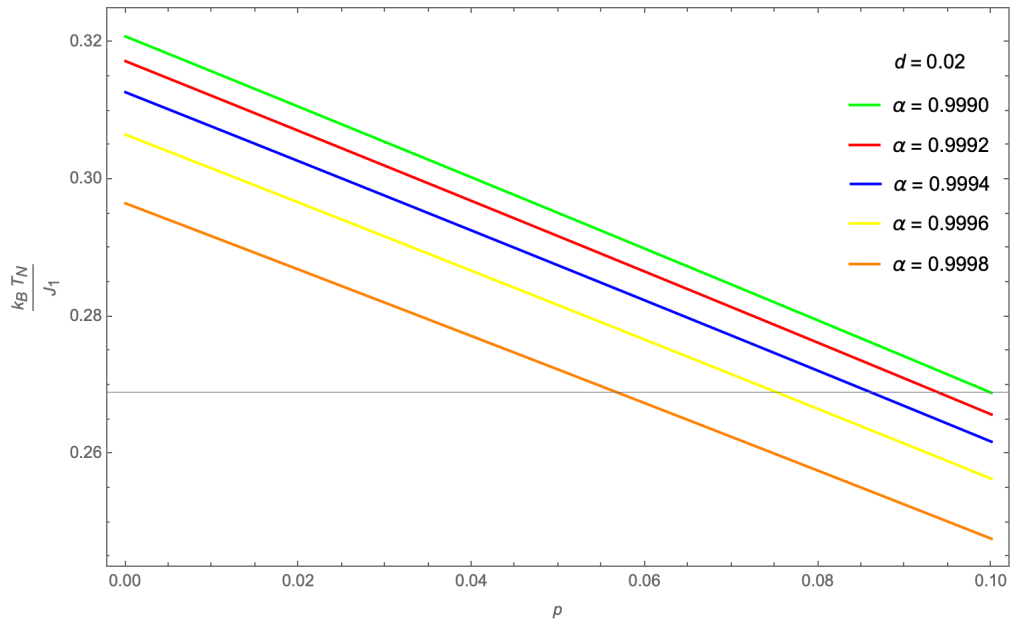
Слика 3.27: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од α од параметра d .



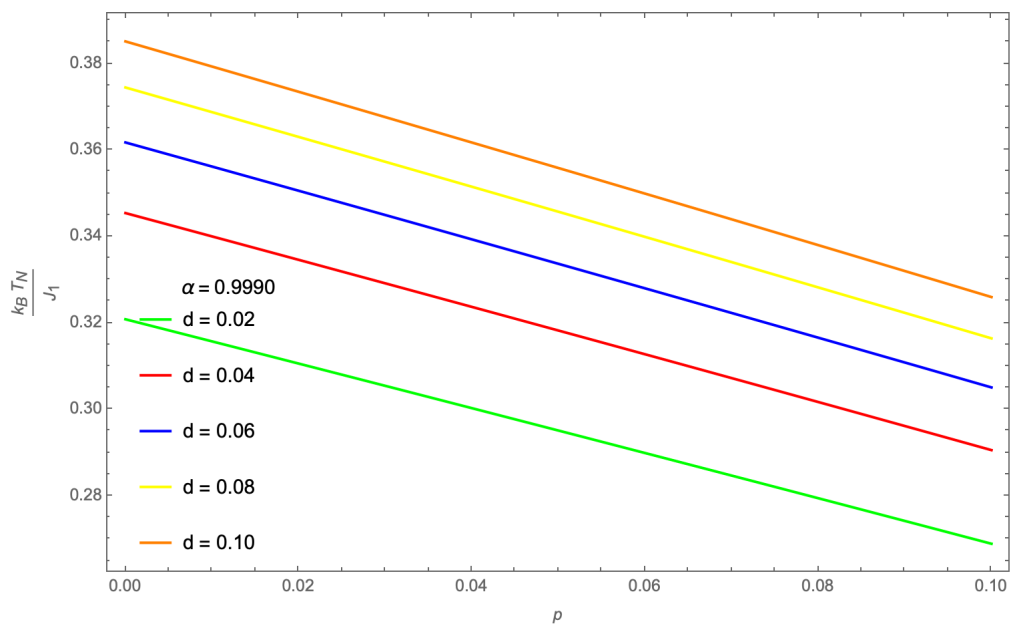
Слика 3.28: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од d од параметра α .



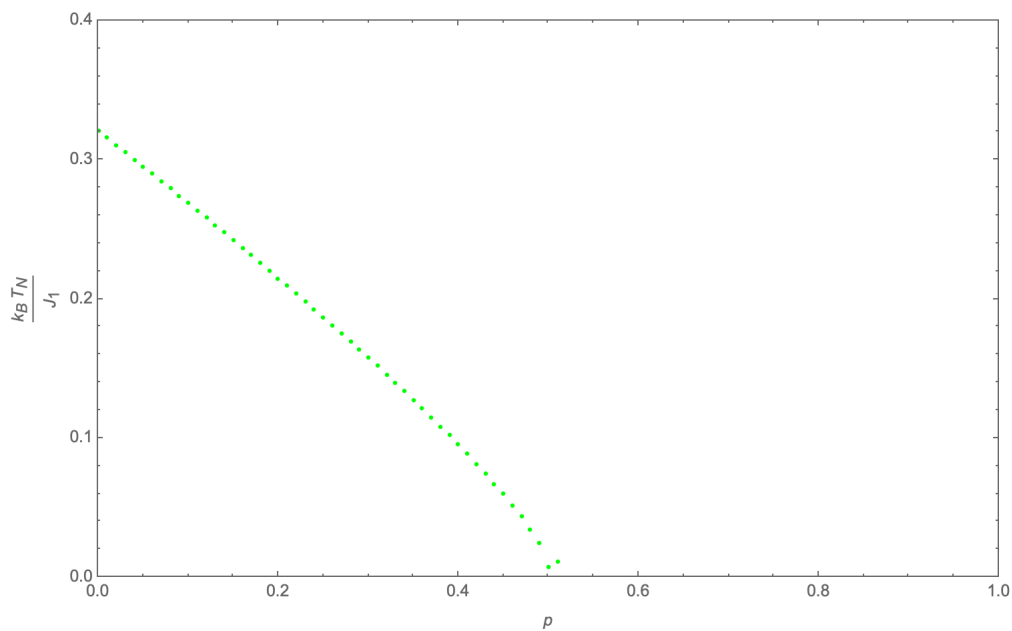
Слика 3.29: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од d од параметра p .



Слика 3.30: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од p од параметра α .



Слика 3.31: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од p од параметра d .



Слика 3.32: Зависност Нелове температуре $\frac{k_B T_N}{J_1}$ од p .

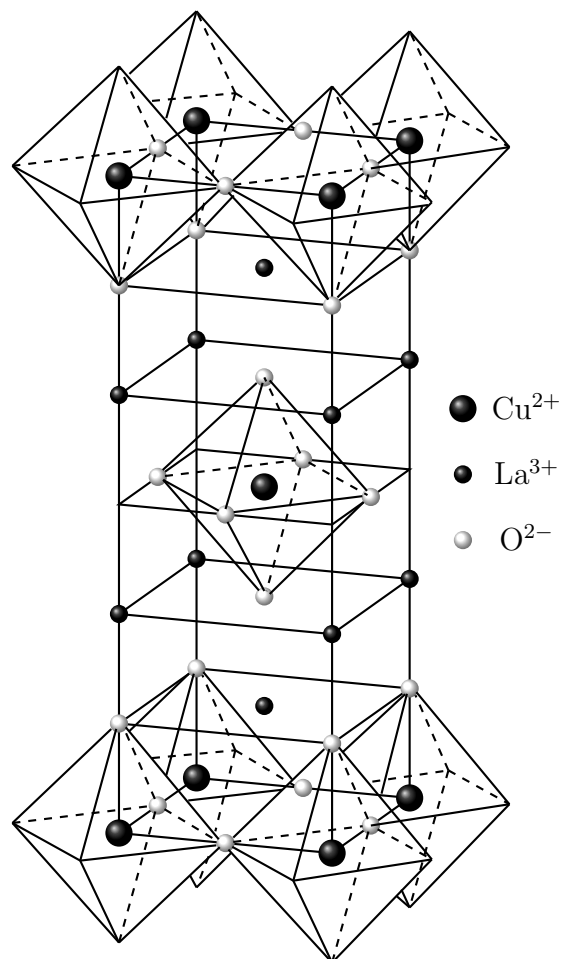
4 Примена резултата на родитељско једињење високотемпературских суперпроводника La_2CuO_4

У другој глави описали смо дводимензионални фрустрирани Хајзенбергов антиферомагнет са Ђалошински-Морија интеракцијом, односно, добили смо изразе за спектре побуђења, магнетизацију и критичну температуру модела, док смо у трећој глави анализирали понашање ових величина за различите вредности параметара фрустрације (p), Ђалошински-Морија интеракције (d) и анизотропије (α). У овој глави искористићемо овај модел да опишемо једињење La_2CuO_4 које представља родитељско једињење високотемпературских суперпроводника, при чему ће прво бити описана кристална структура овог једињења и његова магнетна решетка, затим ће резултати Главе 2 бити примењени на опис овог једињења и одређивање релевантних параметара, након чега ће добијени резултати бити упоређени са експерименталним подацима доступним из литературе.

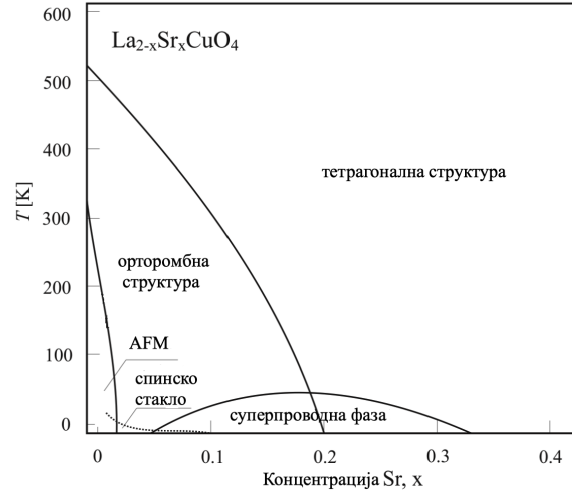
4.1 Структура La_2CuO_4

Кристалну структуру једињења La_2CuO_4 [16], дату на Слици 4.1, чине CuO_2 равни, које су међусобно удаљене приближно 0.66 nm, и између којих се налазе две LaO равни. Примећујемо да јони бакра у CuO_2 равни образују правоугаону решетку и окружени су са шест јона кисеоника који образују октаедарску структуру око сваког јона бакра. Кисеоник је од бакра удаљен приближно 0.19 nm у равни, а приближно 0.24 nm у правцу z -осе и због тога је октаедар издужен у правцу z -осе. Примећујемо да ово једињење има структуру перовскита [17], са хемијском формулом ABO_3 , чију идеалну структуру чине кубна кристална решетка код које се око неметалног катјона В формира октаедарска структура од анјона кисеоника при чему осам таквих октаедара окружују метални катјон А. На основу фазног дијаграма La_2CuO_4 који је приказан на Слици 4.2 видимо да лантан изнад температуре $T_c \approx 530\text{K}$ [18] кристалише у тетрагоналном систему, док на нижим температурама кристалише у орторомбном систему. У кристалу, лантан улази као La^{3+} , кисеоник као O^{2-} , а бакар као Cu^{2+} . Самим тим, атоми бакра отпуштају два електрона, један са 4s и један са 3d љуске, што доводи до тога да се у 3d љусци налази једна шупљина спина $S = \frac{1}{2}$. Спинови непопуњених 3d љуски образују магнетну кристалну решетку у орторомбној фази која је приказана на Слици 4.3 [16]. У магнетној кристалној решетки посматрамо само интеракције у равни и то интеракције измене првих J_1 и других J_2 најближих суседа, док занемарујемо интеракције измене између суседа у различитим равнима решетке $J_{\perp}^{aa}$ и $J_{\perp}^{ab}$. То значи да, иако је решетка тродимензионална са интеракцијама измене у равни и између равни, ову решетку можемо описати дводимензионалним моделом,

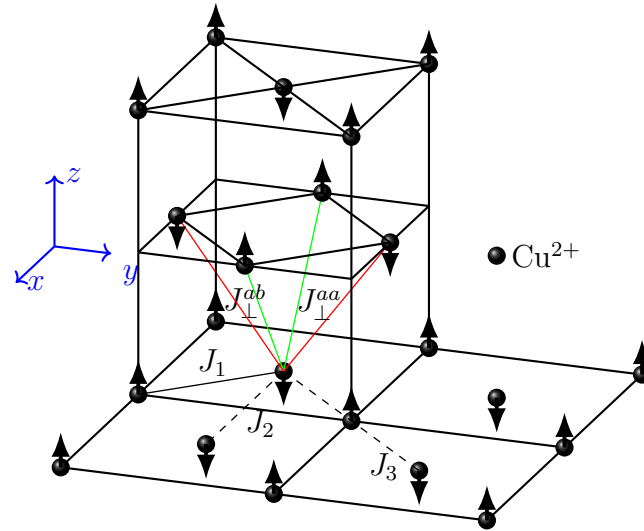
тзв. квази-двоступенчатом решётке [14] [19].



Слика 4.1: Кристална елементарна ћелија La_2CuO_4 једињења.



Слика 4.2: Фазни дијаграм La_2CuO_4 у зависности од концентрације стронцијума S_r [18].



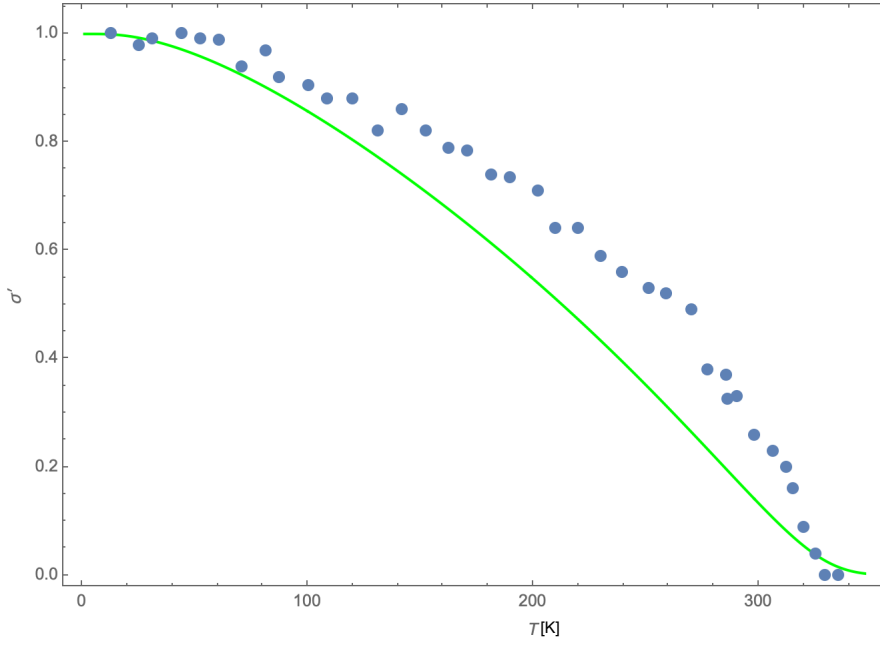
Слика 4.3: Магнетна кристална решетка La_2CuO_4 . Приказани су само Cu^{2+} атоми. Пуном црном линијом је представљена интеракција измене првих J_1 , а испрекиданом линијом интеракција других J_2 најближих суседа. Зеленом и црвеном линијом су представљене интеракције измене између равни код којих посматрамо интеракцију између истих aa и различитих ab подрешетки респективно. Стрелицама су приказани смерови спинова на датим чворовима кристалне решетке.

4.2 Анализа резултата и поређење са експерименталним подацима

Као што смо рекли у прошлом одељку, кристалну решетку La_2CuO_4 можемо описати дво-димензионалним Хајзенберговим моделом. У овом моделу морамо узети у обзир и Ђаловски-Морија интеракцију, означену са $\mathcal{D}$, која се јавља због ротације CuO_6 октаедра при преласку из тетрагоналног у орторомбни кристалографски систем. Тада долази до закретања спинова ван равни што узрокује појаву феромагнетизма унутар сваке CuO_2 равни. Овај модел можемо описати хамилтонијаном (2.1), датим у Глави 2, и искористити добијене изразе за спектар елементарних ексцитација (2.45), магнетизацију (2.82) и критичну температуру (2.88). Да бисмо могли резултате нашег модела упоредити са доступним експерименталним подацима неопходно је одредити параметре J_1 , α , d и p , што се може урадити познавајући експерименталне вредности за геп елементарних ексцитација. На основу података из референце [20] гепои побуђења на 100K су $\omega_{1\mathbf{k}=0} = 2.3\text{meV}$ и $\omega_{2\mathbf{k}=0} = 5\text{meV}$. Знајући ове вредности, можемо одредити параметре J_1 и α , док параметре p и d бирамо тако да добијемо Нелову температуру што ближе експериментално одређеној ($T_N \approx 325\text{K}$ [20]). Поступак одређивања параметара се своди на то да познавајући вредности $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ и $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ на 100K и узимајући одређену вредност магнетизације на тој температури решавамо систем једначина (2.50) и добијамо вредности параметара J_1 и α (за фиксирану вредност параметра d). Са добијеним параметрима J_1 и α тражимо магнетизацију (2.82), а након тога уз помоћ ње тражимо нове вредности параметара J_1 и α . Овај поступак се понавља све док се вредности за магнетизацију у две узастопне итерације не подударају до задовољавајућег нивоа тачности. Након тога се рачуна угао скретања θ и Нелова температура (узима се да је параметар $p = 0.09$, [21]). Цео овај поступак се понавља, али за другачију вредност параметра d све док се не добије што ближе вредност Нелове температуре експерименталној вредности. На тај начин, добијен је следећи скуп параметара

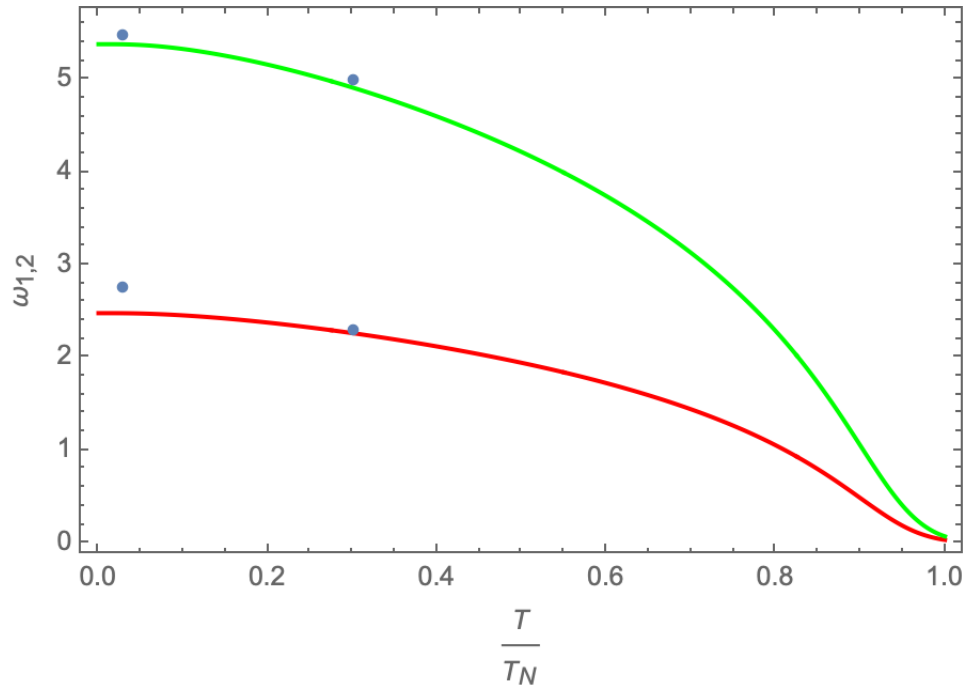
$$J_1 = 110.251\text{meV}, \quad \alpha = 0.99987, \quad d = 0.035, \quad p = 0.09. \quad (4.1)$$

Користећи (4.1), аналогним поступком који је примењен у Глави 3 можемо наћи зависност магнетизације и енергетског гепа од температуре и то упоредити са експерименталним вредностима. Експерименталне вредности за магнетизацију и енергетски геп су преузете из референце [20]. На Слици 4.4 приказана је зависност квадрата односа магнетизације на температури T и апсолутној нули $\sigma' \equiv \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2$ од температуре добијена користећи параметре нашег модела, заједно са експерименталним подацима. На основу Сlike 4.4, можемо закључити да имамо довољно добро слагање са експериментом. Због нумеричке интеграције примећујемо да, уместо



Слика 4.4: Зависност квадрата односа магнетизације $\sigma' \equiv \left(\frac{\sigma}{\sigma_0}\right)^2$ од температуре $T[\text{K}]$. Пуна линија описује зависност добијену на основу параметара нашег модела : $J_1 = 110.251\text{meV}$, $\alpha = 0.99987$, $d = 0.035$, $p = 0.09$. Тачке представљају експерименталне податке преузете из референце [20].

наглог пада, крива глатко клизи. Добро слагање може се уочити и ако посматрамо зависност гепова $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ и $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ од температуре у поређењу са експерименталним вредностима (Слика 4.5).



Слика 4.5: Зависност гена $\omega_1 \equiv \omega_{1\mathbf{k}=0}$ (црвена линија) и $\omega_2 \equiv \omega_{2\mathbf{k}=0}$ (зелена линија) од температуре $T \equiv T[K]$ добијене на основу параметара нашег модела : $J_1 = 110.251 meV$, $\alpha = 0.99987$, $d = 0.035$, $p = 0.09$. Тачке представљају експерименталне податке преузете из референце [20].

5 Закључак

У овом раду испитивали смо дводимензионални фрустрирани Хајзенбергов модел са спинском анизотропијом и Ђалошински-Морија интеракцијом применом методе Гринових функција у оквиру тјабликовске апроксимације. Анализирали смо спектар елементарних ексцитација, магнетизацију и критичну температуру модела при промени параметара модела, односно, анизотропије α , фрустрације $p = \frac{J_2}{J_1}$ и Ђалошински-Морија интеракције $d = \frac{D}{J_2}$. Најпре смо испитивали магнетонске енергије у центру Брилуенове зоне. На основу наших резултата можемо закључити да магнетонска енергија у центру Брилуенове зоне $\omega_{1\mathbf{k}=0}$ испољава јаку зависност од анизотропије (без обзира на вредност преостала два параметра), тј. опада како расте параметар α и у случају изотропног модела ($\alpha = 1$) постаје једнака нули. Уједно испољава слабу зависност од параметра p (са порастом тог параметра слабо опада) и параметра d (споро расте са порастом d). С друге стране, магнетонска енергија у центру Брилуенове зоне $\omega_{2\mathbf{k}=0}$ слабо зависи од анизотропије и фрустрације, тачније има веома благ пад (без обзира на вредности преостала два параметра). Ова магнетонска енергија уједно показује јаку зависност од Ђалошински-Морија интеракције, односно, расте са порастом параметра d , док за $d = 0$ нестаје.

Анализа понашања магнетизације на $T = 0\text{K}$ показује слаб пад магнетизације σ_0 са порастом параметра α . Зависност магнетизације σ_0 од Ђалошински-Морија интеракције показује да са порастом параметра d магнетизација благо расте. Ако се посматра зависност магнетизације σ_0 од фрустрације p , примећује се слаб пад магнетизације за мале вредности фрустрације, док за фрустрацију $p \approx 0.5$ магнетизација ишчежава. Ово говори да са порастом интеракције измене других најближих суседа J_2 (која је антиферромагнетна) долази до разуређења система и преласка у парамагнетну фазу. На крају, посматрањем зависности магнетизације од температуре закључујемо да температура фазног прелаза опада са порастом параметра α и p , а расте са порастом параметра d .

Испитивањем понашања температуре на којој долази до фазног прелаза (Нелова температура) закључујемо да она опада са порастом параметра α (без обзира на промену параметара p и d). Закључили смо такође да Нелова температура расте са порастом Ђалошински-Морија интеракције d (без обзира на промену параметара α и p). Најзад, Нелова температура опада са порастом фрустрације и за вредност $p = 0.5$ постаје једнака нули, што се очекивано подудара са резултатима добијеним приликом испитивања магнетизације.

Да бисмо проверили колико је дводимензионални фрустрирани Хајзенбергов антиферромагнет са спинском анизотропијом и Ђалошински-Морија интеракцијом погодан за описивање стварних једињења, експерименталне податке за магнетизацију и енергетски геп родитељског

једињења високотемпературских суперпроводника, оксида La_2CuO_4 , упоредили смо са резултатима које предвиђа наш модел. При томе смо закључили да модел даје задовољавајуће слагање са експерименталним резултатима.

А Прилог

Интеграција у инверзном простору

За цртање графика који су приказани у овом раду коришћена је нумеричка интеграција. У том циљу у изразима за дисперзиону релацију и магнетизацију извршен је прелаз са сума на интеграле користећи релацију [22, 23]

$$\frac{1}{N_d} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{V_0}{(2\pi)^d} \int_{V_{\text{IBZ}}} d^d \mathbf{k} F(\mathbf{k}), \quad (\text{A.1})$$

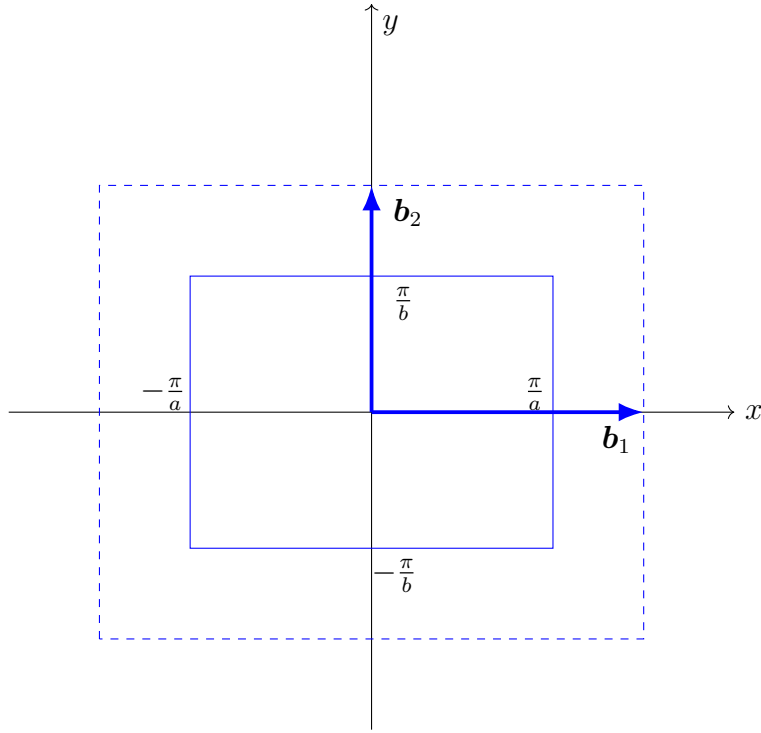
где N_d означава број чворова решетке, V_0 је запремина подрешетке (у случају правоугаоне решетке $V_0 = ab$), а d означава димензију система (у случају правоугаоне решетке $d = 2$). Интеграција се врши по запремини прве Брилуенове зоне V_{IBZ} . Ова зона се може одредити цртањем Вигнер-Зајцове елементарне ћелије у инверзном простору. Ако векторе translације инверзне решетке означимо са $\mathbf{b}_i$ ($i = 1, 2, 3$), можемо их изразити преко вектора translације директне решетке $\mathbf{a}_i$ као $\mathbf{a}_i \cdot \mathbf{b}_j = 2\pi\delta_{ij}$ [22]. У случају правоугаоне решетке параметра a и b вектори директне решетке су

$$\mathbf{a}_1 = a\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{a}_2 = b\mathbf{e}_y. \quad (\text{A.2})$$

Тада су вектори реципрочне решетке

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a}\mathbf{e}_x, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{b}\mathbf{e}_y, \quad (\text{A.3})$$

што је приказано испрекиданим правоугаоником на Слици A.1.



Слика А.1: Приказ реципрочне решетке и прве Брилуенове зоне.

Компоненте таласног вектора $\mathbf{k}$ узимају вредности $k_x \in [-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}]$ и $k_y \in [-\frac{\pi}{b}, \frac{\pi}{b}]$. Израз на десној страни у (A.1) можемо исписати као

$$\frac{V_0}{(2\pi)^d} \int_{V_{\text{IBZ}}} d^d \mathbf{k} F(\mathbf{k}) = \frac{ab}{(2\pi)^2} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{b}}^{\frac{\pi}{b}} dk_x dk_y F(ak_x, bk_y). \quad (\text{A.4})$$

У случају нумеричке интеграције пожељно је да се смањи област интеграције што се може урадити увођењем смене $x_i = a_i k_i$ ($i = 1, 2$, $x_1 \equiv x$, $x_2 \equiv y$, $a_1 \equiv a$, $a_2 \equiv b$). У том случају, интеграл (A.4) постаје

$$\frac{V_0}{(2\pi)^d} \int_{V_{\text{IBZ}}} d^d \mathbf{k} F(\mathbf{k}) = \frac{1}{(2\pi)^2} \int_{-\pi}^{\pi} \int_{-\pi}^{\pi} dx dy F(x, y). \quad (\text{A.5})$$

Литература

- [1] J. George Bednorz and K. Alex Müller, *Z. Physik B*, **64**, 189, (1986).
- [2] Antonio Sergio Teixeira Pires and A. Sergio, *Theoretical tools for spin models in magnetic systems*. IOP Publishing Bristol, (2021).
- [3] Wolfgang Nolting and Anupuru Ramakanth, *Quantum theory of magnetism*. Springer Science & Business Media, 2009.
- [4] Assa Auerbach, *Interacting electrons and quantum magnetism*. Springer Science & Business Media, (2012).
- [5] H.T. Diep et al, *Frustrated spin systems*. World scientific, (2013).
- [6] Peter Kopietz, Lorenz Bartosch, and Florian Schütz, *Introduction to the functional renormalization group*, volume 798. Springer Science & Business Media, (2010).
- [7] Sergei Vladimirovich Tiablikov, *Methods in the quantum theory of magnetism*. Springer, (2013).
- [8] Peter Fröbrich and Philip-John Kuntz, *Phys. Rep.* **432** 223-304 (2006).
- [9] Milica S. Rutonjski, Milan R. Pantić, and Milica V. Pavkov-Hrvojević, *physica status solidi (b)*, **258**, 2000508, (2021).
- [10] N. David Mermin and Herbert Wagner, *Phys. Rev. Lett.*, **17**, 1133, (1966).
- [11] A. L. Alistratov and D. A. Yablonskii, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **67**, 2285, (1989).
- [12] V. D. Doroshev, V. N. Krivoruchko, M. M. Savosta, A. A. Shestakov, and D. A. Yablonskii, *Journal of Experimental and Theoretical Physics*, **74**, 102, (1992).
- [13] A. L. Chernyshev, *Phys. Rev. B*, **72**(17):174414, (2005).
- [14] K. V. Tabunshchuk and R. J. Gooding, *Phys. Rev. B*, **71**, 214418, (2005).
- [15] Subir Sachdev, *Quantum Phase Transitions*. Cambridge University Press, 2011.

- [16] М. С. Рутоњски, *Теоријска истраживања особина јако корелисаних квази-двостепенских недупираних купрата (према материјалу докторске тезе)*. Природно-математички факултет, Нови Сад, (2011).
- [17] Francis S. Galasso, *Structure, properties and preparation of perovskite-type compounds: international series of monographs in solid state physics*, volume 5. Elsevier, (2013).
- [18] Ж. Ковачевић, *Утицај примјеса на електронску структуру CuO_2 равни високотемпературних суперпроводника (према материјалу докторске тезе)*. Природно-математички факултет, Подгорица, (2000).
- [19] Kyrylo V. Tabunshchuk and R. J. Gooding, *J. Phys.: Condens. Matter*, **17**, 6701, (2005).
- [20] B. Keimer, R. J. Birgeneau, A. Cassanho, Y. Endoh, M. Greven, M. A. Kastner, and G. Shirane, *Z. Physik B*, **91**, 373, (1993).
- [21] R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, C. D. Frost, T. E. Mason, S. W. Cheong and, and Z. Fisk, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5377, (2001).
- [22] Charles Kittel and Ching-yao Fong, *Quantum theory of solids*. Wiley, (1987).
- [23] Jenő Sólyom, *Fundamentals of the Physics of Solids: Volume 1: Structure and Dynamics*, volume 1. Springer Science & Business Media, (2007).

Биографија

Денис Мујо је рођен 20.4.1998. године у Приштини. Основну школу завршио је 2013. године у Основној школи „Жарко Зрењанин” у Кикинди. Средњу школу завршио је 2017. године такође у Кикинди, у Гимназији „Душан Васиљев”, смер природно-математички.



У школској 2017/2018. уписао је основне студије на Природно-математичком факултету у Новом Саду, на Департману за физику, које је завршио 2021. године. У школској 2021/2022. на Природно-математичком факултету у Новом Саду уписао је мастер студије на Департману за Физику, ужа област Теоријска физика кондензоване материје.

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Редни број:

РБР

Идентификациони број:

ИБР

Тип документације:

ТД

Монографска документација

Тип записа:

ТЗ

Текстуални штампани материјал

Врста рада:

ВР

Мастер рад

Autor:

АУ

Денис Мујо

Ментор:

МН

др Милица Рутоњски

Наслов рада:

НР

Утицај спинске анизотропије и Ђалошински-Морија интеракције на магнетне особине дводимензионалног фрустрираног Хајзенберговог антиферромагнета са спином $S=1/2$

Језик публикације:

ЈП

српски (ћирилица)

Језик извода:

ЈИ

српски (ћирилица) / engleski

Земља публикавања:

ЗП

Србија

Уже географско подручје

УГП

Војводина

Година:

ГО

2023

Издавай:

ИЗ

Ауторски репринт

Место и адреса:

МА

Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића
4, Нови Сад

Физички опис рада:

ФО

(поглавља/страна/цитата/табела/графика/додатака)
(5/81/19/0/45/1)

Научна област:

НО

Физика

Научна дисциплина: НД	Теоријска физика кондензоване материје
Кључне речи: КР	Ђалошински-Морија интеракција, дводимензионални Хајзенбергов модел, квази-дводимензионални модел, фрустрација, Гринове функције
Чува се: ЧУ	Библиотека департмана за физику, ПМФ-а у Новом Саду
Важна напомена: ВН	Нема
Извод: ИЗ	У овом раду се анализира дводимензионални фрустрирани Хајзенбергов модел са Ђалошински-Морија интеракцијом и спинском анизотропијом
Датум прихватања теме од НН већа: ДП	
Датум одбране: ДО	
Чланови комисије: КО	
Председник комисије:	др Слободан Радошевић, редовни професор Природно-Математички факултет, Нови Сад
Члан:	др Горан Штрбац, ванредни професор Природно-Математички факултет, Нови Сад
Члан:	др Милица Рутоњски, доцент, Природно-Математички факултет, Нови Сад

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type:

Monograph publication

DT

Type of record:

Textual printed material

TR

Content code:

Final paper

CC

Author:

Denis Mujo

AU

Mentor/comentor:

dr Milica Rutonjski

MN

Title:

The Influence of Spin Anisotropy and Dzyaloshinskii-Moriya
Interaction on Magnetic Properties of Twodimensional
Frustrated Heisenberg Antiferromagnet with Spin $S=1/2$

TI

Language of text:

Serbian (Cyrillic)

LT

Language of abstract:

English

LA

Country of publication:

Serbia

CP

Locality of publication:

Vojvodina

LP

Publication year:

2023

PY

Publisher:

Author's reprint

PU

Publication place:

Faculty of Science and Mathematics, Trg Dositeja Obradovića
4, Novi Sad

PP

Physical description:

5/81/19/0/45/1

PD

Scientific field:

Physics

SF

Scientific discipline:

Theoretical Condensed Matter Physics

SD

Key words: KW	Dzyaloshinskii-Moriya interaction, twodimensional Heisenberg model, quasi-twodimensional model, frustration, Green's functions
<i>Holding data:</i> HD	Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4
<i>Note:</i> N	none
<i>Abstract:</i> AB	This paper analyses twodimensional frustrated Heisenberg antiferromagnet with Dzyaloshinskii-Moriya interaction and spin anisotropy
<i>Accepted by the Scientific Board:</i>	
<i>Defended on:</i> DE	
<i>Thesis defend board:</i> DB	
<i>President:</i>	dr Slobodan Radošević, Full Professor Faculty of Science, Novi Sad
<i>Member:</i>	dr Goran Štrbac, Associate Professor Faculty of Science, Novi Sad
<i>Member:</i>	dr Milica Rutonjski, Assistant Professor Faculty of Science, Novi Sad