



УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ
ФАКУЛТЕТ
ДЕПАРТАМАН ЗА ФИЗИКУ



Примена фрустрираног Хајзенберговог модела на пниктиде гвожђа

Мастер рад

Ментор: Кандидат:
проф. др Милан Пантић Константин Видаковић

Нови Сад, 2022.

Садржај

Увод	5
1 Пникиди гвожђа и теоријски модели	7
1.1 Структура и особине пникида	7
1.2 Хајзенбергов модел	10
1.3 Спонтано нарушење симетрије	11
1.4 Фрустрација	12
1.5 Теорија спинских таласа	13
2 Дводимензионална Нелова фаза са биквадратном изменом	17
2.1 Репрезентација Дајсон-Маљејева	18
2.2 Самосагласност	21
2.3 Нумерички резултати	22
3 Тродимензионална колинеарна фаза	25
3.1 Модел	26
3.2 Брзине спинских таласа	30
3.3 Самосагласне једначине	30
3.4 Посртајућа магнетизација	31
3.5 Нумерички резултати	32
3.6 Резултати и дискусија	33
4 Тродимензионална колинеарна фаза са биквадратном изменом	39
4.1 Модел	40

4.2	Самосагласне једначине и посртавајућа магнетизација	43
4.3	Нумерички резултати	43
5	Пниктиди гвожђа	51
5.1	Резултати за тродимензионалну колинеарну фазу без биквадратне измене	51
5.2	Резултати за тродимензионалну колинеарну фазу са биквадратном из- меном	55
6	Закључак	59
Додатак А		63
A.1	Дводимензионални интеграл	63
A.2	Тродимензионални интеграл	64
Литература		67

Увод

Суперпроводна својства једињења LaOFeAs су први пут откривена 2006. године [8]. Критична температура је износила само 3,5 K. Једињење LaONiP је имало само за 1 K вишу критичну температуру. 2008. су Камихара и др. [7] открили суперпроводност у једињењу допираним флуором La_{1-x}F_xFeAs са релативно високом критичном температуром $T_c = 26$ K. Убрзо су откривени други материјали који уместо лантана имају друге елементе из групе ретких земаља (церијум, празеодијум и самаријум) код којих је критична температура досегла 55 K [13]. Наведени материјали спадају у групу пниктида гвожђа.

Захваљујући привлачењу између електрона због електрон-фонон спрезања, у конвенционалним суперпроводницима долази до формирања Куперових парова. Бардин-Купер-Шрифер (BCS) теорија [6] која описује овај феномен је објављена још 1957. године. У материјалима као што су купрати и пниктиди још увек није познат механизам који објашњава суперпроводност, али се зна да то није посредством електрон-фонон спрезања.

Постоје извесне сличности и разлике између купрата и пниктида гвожђа. Суперпроводност код обе класе једињења повезана је са њиховим магнетним особинама. Привлачна интеракција између носилаца наелектрисања мора бити изазвана магнетним флуктуацијама. На фазним дијаграмима обе класе једињења антиферомагнетна фаза дугог домета се налази у близини суперпроводне фазе. У случају пниктида те две фазе се чак преклапају.

У овом раду ћемо се посветити проучавању Хајзенберговог $J_1 - J_2 - J_c$ модела у три димензије са биквадратном изменском интеракцијом и без ње у оквиру самосагласне

теорије спинских таласа на апсолутној нули као и применом тог модела на пниктиде гвожђа. Разлог за проучавање тродимензионалног модела лежи у експерименталним резултатима приликом расејања неутрона.

У Глави 1, представили смо структуру и особине пниктида као и моделни хамилтонијан од ког полазимо. Разматрани су појмови спонтаног нарушења симетрије и фрустрације и изложена је теорија спинских таласа. Репрезентација Дајсон-Маљејева примењена је на дводимензионалну Нелову фазу са биквадратном изменом у Глави 2. У Главама 3 и 4 уведена је и проучавана тродимензионална колинеарна фаза без биквадратне интеракције и са њом. Приказани су нумерички прорачуни и представљени су резултати за различите вредности изменских константи. У Глави 5 наши резултати фитовани су на резултате добијене углавном теоријским претпоставкама за пниктиде $SrFe_2As_2$ и $BaFe_2As_2$, као и на резултате добијене у експериментима са расејањем неутрона за $CaFe_2As_2$. У Глави 6 сумирани су добијени резултати.

Глава 1

Пникиди гвожђа и теоријски модели

1.1 Структура и особине пникида

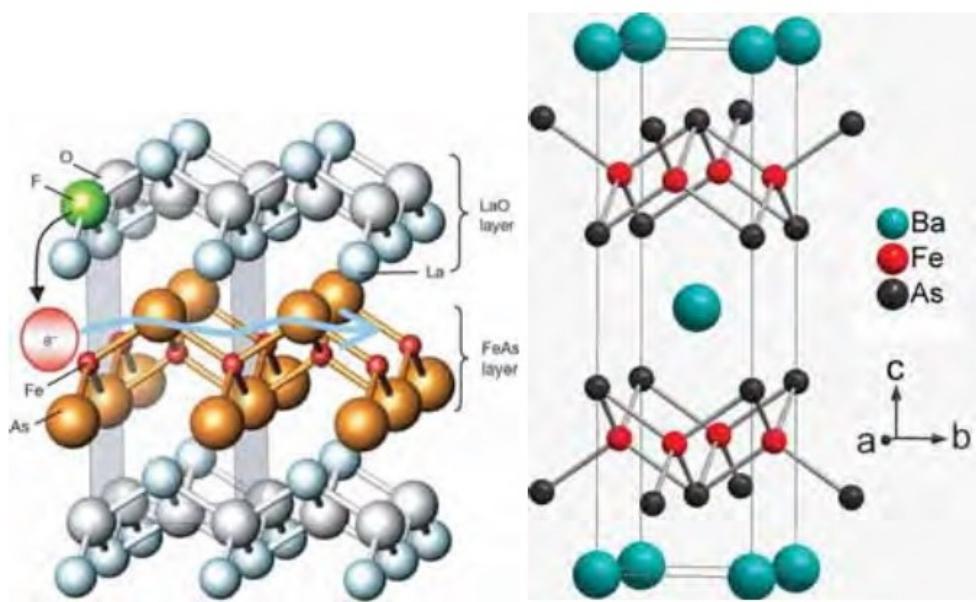
У пниктогене хемијске елементе спадају елементи 15. групе периодног система елемената: азот (N), фосфор (P), арсен (As), антимон (Sb) и бизмут (Bi). Иако није потврђено, претпоставља се да је и синтетички елемент московијум (Ms) такође пниктогени елемент. Назив им потиче од грчке речи *пнигеин* што значи гушити, због особине азота да изазива гашење. Пникиди су једињена у којима се јављају атоми пниктогених елемената. Од значаја за физику су пникиди гвожђа код којих је откријена особина суперпроводности.

До сада су откријене четири фамилије суперпроводних пникида гвожђа [4]: (i) тип-1111 ROFeAs где су R = La, Sm, Ce, Nd, Pr и Gd елементи ретких земаља, (ii) тип-122 AFe₂As₂ где су A = Ba, Ca, Sr и Eu земноалкални метали, (iii) тип-111 LiFeAs и NaFeAs и (iv) тип-22426 (Fe₂Pn₂)(A₄M₂O₆) где су Pn = P или As пниктогени елементи, A је земноалкални елемент и M = Sc или Cr . На слици 1.1 су приказане типичне кристалне структуре суперпроводних пникида гвожђа.

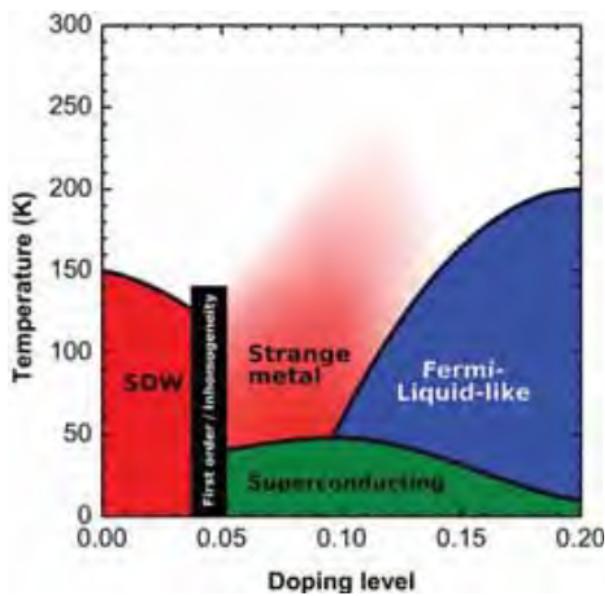
Сва ова једињења на собној температури имају тетрагоналну структуру. Њихова кристална структура се састоји од Fe-As слојева раздвојених различитим врстама

интерстицијалних слојева. Пниктиди на температурата у опсегу од 100 К до 200 К доживљавају структурни прелаз првог или другог реда из тетрагоналне структуре у орторомбичну. Такође, на температури $T_N \approx 150$ К одвија се прелаз из немагнетне у тракасту антиферомагнетну фазу. Верује се да је суперпроводност у пниктидима гвожђа повезана са квадратном решетком FeAs слојева. FeAs слој је у ствари састављен од три блиске равни: једне квадратне, која се састоји од атома гвожђа и која се налази између две равни састављене од атома As. За разлику од слојева CuO₂ у купратима који се могу сматрати практично дводимензионалним, слојеви FeAs у пниктидима се описују тетраедрима FeAs_{4/4} који деле заједничку ивицу, што указује на важност посматрања магнетизма у три димензије.

Недопирана, ова јединења спадају у антиферомагнетне метале. Док су купрати на апсолутној нули Мотови изолатори, пниктиди гвожђа су лоши метали са дугодометним колинеарним антиферомагнетним уређењем. На слици 1.2 је приказан типични фазни дијаграм суперпроводних пниктида гвожђа. У случају недопираних или слабо допираних материјала, материјали се налазе у фази SDW (spin-density wave) са дугодометним антиферомагнетним уређењем. Са повећањем допирања, материјал ће прећи у суперпроводну фазу. Област на дијаграму обојена у црно представља коегзистенцију суперпроводне и магнетостатичке фазе. Даљим повећањем нивоа допирања материјал прелази у фазу Фермијеве течности. Изнад области суперпроводности на фазном дијаграму се налази фаза која представља метал са необичном зависношћу специфичне проводности од температуре.



Слика 1.1: Шематски приказ структура пниктида: (а) LaOFeAs , (б) BaFe_2As_2



Слика 1.2: Фазни дијаграм суперпроводних пниктида гвожђа

1.2 Хајзенбергов модел

Вероватно један од најчешће коришћених и најједноставнијих модела који описује интеракцију електрона у кристалној решетки је Хабардов модел [5] чији хамилтонијан има облик

$$H = -t \sum_{\langle i,j \rangle \sigma} (c_{i\sigma}^\dagger c_{j\sigma} + c_{j\sigma}^\dagger c_{i\sigma}) + U \sum_i c_{i\uparrow}^\dagger c_{i\uparrow} c_{i\downarrow}^\dagger c_{i\downarrow} - \mu \sum_{i\sigma} c_{i\sigma}^\dagger c_{i\sigma}, \quad (1.1)$$

где су $c_{i\sigma}^\dagger$ и $c_{j\sigma}$ фермионски оператори који креирају, односно анихилирају електрон са одговарајућим спином σ . Параметар t је интеграл преноса електрона са чвора на чвор, U је енергија кулоновског одбијања два електрона на истом чвиру, док је μ хемијски потенцијал. Овај хамилтонијан садржи само једну орбиталу по чвиру и садржи основне корелационе ефекте. Сума је ограничена на најближе суседе што је обележено угластим заградама. Постоје и сложеније верзије Хабардог модела којима се у овом раду нећемо бавити.

Хабардов модел се у случају јаког кулоновског одбијања и полупопуњене зоне своди на антиферомагнетни Хајзенбергов модел

$$H = J \sum_{i,j} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.2)$$

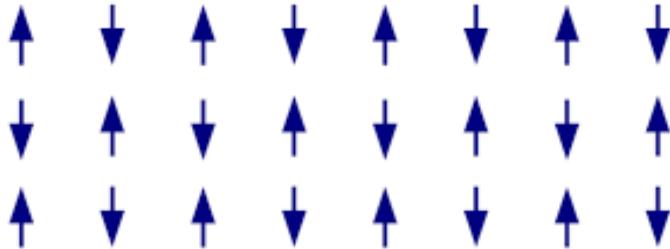
где су S_i и S_j спински векторски оператори, а $J > 0$ изменска константа, која је повезана са параметрима Хабардог модела као $J = 4t^2/U$.

Како јон Fe^{2+} у пникидима гвожђа има паран број електрона у валентној љусци могуће вредности спина су $S = 0, 1, 2$. На основу теоријских разматрања и експерименталних резултата, погодно је одабрати $S = 1$ за вредност спина [16].

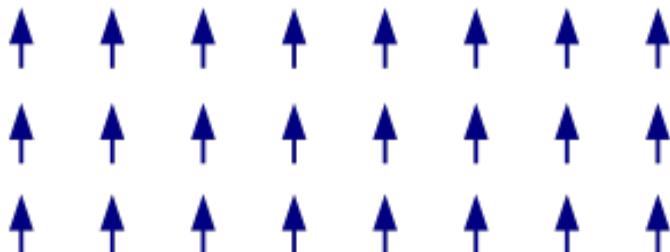
У случају када је $J > 0$ имамо антиферомагнетно уређење приказано на слици 1.3. Основно стање на температури $T = 0$ К је Нелово стање са суседним спиновима који су антипаралелно усмерени. Решетку можемо поделити на две подрешетке, при чему би спинови у свакој подрешетки били међусобно паралелни. Интеракција постоји само између суседних спинова који припадају различitim подрешеткама. Због

постојања квантно-механичких флуктуација, класично основно стање није право својствено стање хамилтонијана.

За $J < 0$ уређење је феромагнетно (слика 1.4). Основно класично стање феромагнетне фазе подудара се са основним квантотехничким стањем.



Слика 1.3: Антиферомагнетно уређење



Слика 1.4: Феромагнетно уређење

1.3 Спонтано нарушење симетрије

У присуству спољног магнетног поља спинови се усмеравају дуж линија поља. Притом систем који је био изотропан добија преферентни правцац. Материјал који је феромагнетик у одсуству магнетног поља има коначну вредност магнетизације. Стога, систем који проучавамо има мању симетрију од хамилтонијана који проучавамо. Нарушена је ротациона симетрија. Овакав процес назива се спонтано нарушење симетрије.

У лимесу када магнетно поље тежи нули, магнетизација која остаје назива се спонтана магнетизација. У антиферомагнетицима, спонтана магнетизација се наиз-

менично мења од чвора до чвора, али њена апсолутна вредност је идентична за обе подрешетке. Насупрот случају феромагнетика, у антиферомагнетицима се јавља такозвана посртјајућа магнетизација која је увек мања од S због квантно-механичких флуктуација око апсолутне нуле. На коначним температурима, магнетизација је додатно редукована због термалних флуктуација.

Као последица спонтаног нарушења симетрије хамилтонијана јављају се бозонске ексцитације без енергијског процепа, тзв. Голдстонови бозони. У случају Хајзенберговог модела нарушена је ротациона спинска симетрија, а одговарајући Голдстонови бозони су спински таласи или магнони.

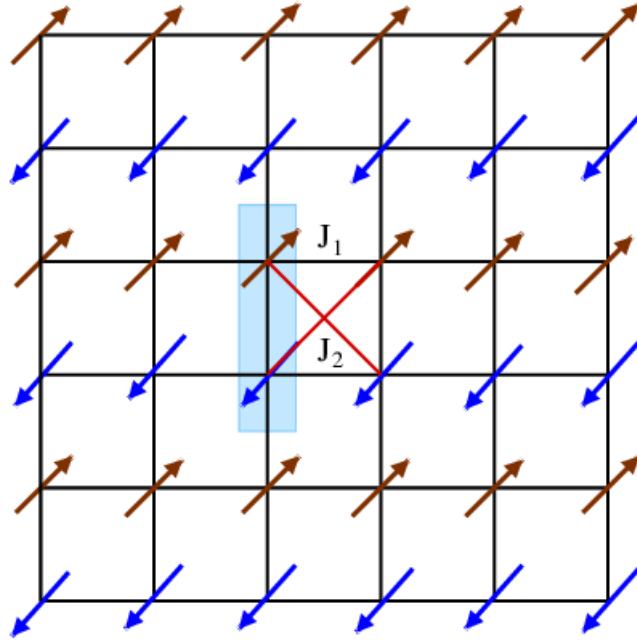
Спински талас је пропагирајући поремећај који се јавља у уређењу магнетних материјала. Ове колективне ексцитације настају у магнетним решеткама са континуалном симетријом. Са становишта еквивалентних квазичестица, спински таласи су познати као магнони, који су бозонске моде спинске решетке за које се може рећи да кореспондирају фононским ексцитацијама кристалне решетке.

1.4 Фрустрација

Појам фрустрација у теорији магнетизма је уведен ради описивања немогућности задовољења свих изменских процеса. Фрустрација може бити узрокована геометријом решетке. Нпр. у случају троугаоне решетке, ако су два спина усмерена антипаралелно, трећи спин је фрустриран јер није могуће да се усмери антиферомагнетно са оба претходно поменута спина истовремено, па класична енергија основног стања не може бити оптимално минимализована. Фрустрацију је могуће увести и додатним изменским константама. Појавиће се додатни изменски члан у хамилтонијану који представља изменску интеракцију између следећих најближих суседа, а облика је

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (1.3)$$

где су $J_{1,2} > 0$ изменске константе, а двострука заграда $\langle\langle i,j \rangle\rangle$ означава следеће најближе суседе. У зависности од односа константи J_1 и J_2 можемо добити две врсте



Слика 1.5: Шематски приказ колинеарне фазе

основног стања. Наравно, разматрамо случај када су обе интеракције антиферомагнетне. Када је $J_1 \gg J_2$ хамилтонијан се практично своди само на интеракциони члан између најближих суседа, па је основно стање Нелово. У другом случају, када је $J_1 \ll J_2$ наступа друго антиферомагнетно стање, тзв. колинеарна фаза, јер спинови који су следећи најближи суседи, покушавају заузети антипаралелне оријентације. Колинеарна фаза је приказана на слици 1.5. У класичном лимесу када $S \rightarrow \infty$, фазни прелаз између Нелове и колинеарне фазе догађа се када је однос изменских константи $J_2/J_1 = 0.5$ [14].

1.5 Теорија спинских таласа

Главни задатак нам је да дијагонализујемо хамилтонијан заснован на Хајзенберговом моделу. Пошто су спински таласи бозонске ексцитације, очигледно је да треба заменити спинске операторе одговарајућим бозонским операторима.

Спинске операторе S^x и S^y на чвиру i заменићемо операторима подизања и спуштања:

$$S_i^+ = S_i^x + iS_i^y, \quad (1.4a)$$

$$S_i^- = S_i^x - iS_i^y. \quad (1.46)$$

Хамилтонијан (1.2) постаје

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^- + S_j^+ S_i^-) \right]. \quad (1.5)$$

Када постоји антиферомагнетно уређење, решетку можемо поделити у две подрешетке A и B . Погодно је заротирати све спинове подрешетке B за угао од 180° око x -осе. За сваки чвор i подрешетке B важе одговарајуће трансформације оператора:

$$S_i^+ \rightarrow S_i^-, \quad (1.6a)$$

$$S_i^- \rightarrow S_i^+, \quad (1.6b)$$

$$S_i^z \rightarrow -S_i^z. \quad (1.6c)$$

а хамилтонијан добија облик

$$H = J \sum_{\langle i,j \rangle} \left[-S_i^z S_j^z + \frac{1}{2} (S_i^+ S_j^+ + S_j^- S_i^-) \right]. \quad (1.7)$$

Постоји више метода за смену спинских оператора бозонским, а најчешће коришћене су репрезентација Холштајн-Примакова, репрезентација Дајсон-Маљејева и репрезентација Швингерових бозона. У овом раду ће бити коришћена репрезентација Дајсон-Маљејева.

Ову репрезентацију увели су Дајсон [2] и Маљејев [9]. У оквиру ове репрезентације спински оператори изражени преко бозонских оператора добијају облик

$$S_i^+ = b_i^\dagger (2S - \hat{n}_i), \quad (1.8a)$$

$$S_i^- = b_i, \quad (1.8b)$$

$$S_i^z = -S + \hat{n}_i. \quad (1.8c)$$

Оператори b_i^\dagger и b_i су бозонски креациони и анихилациони оператори за које важе

комутационе релације

$$[b_i, b_j^\dagger] = \delta_{i,j} \quad \text{и} \quad [b_i, b_j] = [b_i^\dagger, b_j^\dagger] = 0, \quad (1.9)$$

док је $\hat{n}_i = b_i^\dagger b_i$ оператор броја попуњености на чвору i . Након ротације за 180° око x -осе спински оператори за чворове подрешетке B имају облик

$$S_i^+ = b_i^\dagger, \quad (1.10a)$$

$$S_i^- = (2S - \hat{n}_i) b_i, \quad (1.10b)$$

$$S_i^z = -S + \hat{n}_i. \quad (1.10b)$$

У овој репрезентацији спински оператори подизања и спуштања нису више хермитски коњуговани у спинској репрезентацији. У Хајзенберговом моделу (1.2) јављају се само чланови који су квадратни или четвртог степена по бозонским операторима, који могу бити разматрани у апроксимацији средњег поља што нас доводи до ренормализоване или самоконзистентне теорије спинских таласа.

Глава 2

Дводимензионална Нелова фаза са биквадратном изменом

У овом поглављу биће проучавана дводимензионална Нелова фаза са додатном биквадратном изменом J_{bq} [15]. Додатни биквадратни члан у Хајзенберговом моделу је

$$H_{bq} = -J_{bq} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \right)^2, \quad (2.1)$$

где је $J_{bq} > 0$. Заједно са билинеарним чланом, биквадратни члан уводи анизотропију у ефективну изменску константу између феромагнетно и антиферомагнетно уређених спинова. Биквадратни члан има посебан значај у случају вишеселектронских система чији је укупни спин $S \geq 1$.

Проучавамо хамилтонијан облика

$$\begin{aligned} H &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - J_{bq} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \right)^2 \\ &= J \sum_{\langle i,j \rangle} \left(-S_i^z - S_j^z + \frac{1}{2} \left(S_i^\dagger - S_j^\dagger + h.c. \right) \right) \\ &\quad - J_{bq} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(-S_i^z - S_j^z + \frac{1}{2} \left(S_i^\dagger - S_j^\dagger + h.c. \right) \right)^2, \end{aligned} \quad (2.2)$$

уз услов $J, J_{bq} > 0$. Спинови подрешетке B су ротирани.

2.1 Репрезентација Дајсон-Маљејева

Производ спинских оператора у овој репрезентацији добија облик

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = -S^2 + S \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j \right) - \hat{n}_i \hat{n}_j - \frac{1}{2} \left(b_i^\dagger \hat{n}_i b_j^\dagger + b_i \hat{n}_j b_j \right). \quad (2.3)$$

Потребно је увести очекиване вредности

$$n = \langle b_i^\dagger b_i \rangle = \langle b_j^\dagger b_j \rangle, \quad (2.4a)$$

$$a = \langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle = \langle b_i b_j \rangle, \quad (2.4b)$$

где су i и j најближи суседи. Све остале очекиване вредности су једнаке нули због симетрије око z -осе. Сада је потребно декупловати чланове четвртог степена на основу Викове теореме

$$\hat{n}_i \hat{n}_j = b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j \approx n \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) + a \left(b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j \right) - n^2 - a^2, \quad (2.5a)$$

$$b_i^\dagger \hat{n}_i b_j^\dagger = b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_j^\dagger \approx 2ab_i^\dagger b_i + 2nb_i^\dagger b_j^\dagger - 2na, \quad (2.5b)$$

$$b_i \hat{n}_j b_j = b_i b_j^\dagger b_j b_j \approx 2ab_j^\dagger b_j + 2nb_i b_j - 2na. \quad (2.5c)$$

Константне чланове ћемо надаље занемарити. Апроксимација средњег поља за билинеарну измену има облик

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j |^{MF} = \left(S - n - a \right) \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j \right) + \text{const.} \quad (2.6)$$

Сада ћемо размотрити биквадратни члан који је у репрезентацији Дајсон-Маљејева облика

$$\begin{aligned} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2 &= S^4 - 2S^3 \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + \hat{I}_0 \right) \\ &\quad + S^2 \left[\hat{n}_i^2 + \hat{n}_j^2 + 4\hat{n}_i \hat{n}_j + \hat{I}_0^2 + \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) \hat{I}_0 + \hat{I}_0 \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) + \hat{I}'_0 \right] \\ &\quad - S \left[2 \left(\hat{n}_i \hat{n}_j^2 + \hat{n}_i^2 \hat{n}_j \right) + \hat{n}_i \hat{n}_j \hat{I}_0 + \hat{I}_0 \hat{n}_i \hat{n}_j \right] \end{aligned}$$

$$+ \frac{1}{2} \left(+ \hat{I}_0 \hat{I}'_0 + \hat{I}'_0 \hat{I}_0 + (\hat{n}_i + \hat{n}_j) \hat{I}'_0 + \hat{I}'_0 (\hat{n}_i + \hat{n}_j) \right) \right] \\ + \hat{n}_i^2 \hat{n}_j^2 + \frac{1}{4} \hat{I}'_0^2 + \frac{1}{2} \left(\hat{n}_i \hat{n}_j \hat{I}'_0 + \hat{I}'_0 \hat{n}_i \hat{n}_j \right), \quad (2.7)$$

где смо увели \hat{I}_0 и \hat{I}'_0

$$\hat{I}_0 = b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j \quad \text{и} \quad \hat{I}'_0 = b_i^\dagger \hat{n}_i b_j^\dagger + b_i \hat{n}_j b_j, \quad (2.8)$$

а i и j представљају најближе суседе. У апроксимацији средњег поља биквадратни члан се своди на

$$\left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \right)^2 \Big|^{MF} = - \left[2S^3 - 2S^2(1 + 5(n+a)) + S(18(n+a)^2 + 8(n+a) + 1) \right. \\ \left. - 12(n+a)^3 - 9(n+a)^2 - 2(n+a) \right] \cdot \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + \hat{I}_0 \right) + \text{const.} \quad (2.9)$$

Занемаривањем свих константних чланова, хамилтонијан средњег поља је

$$H_{MF} = \left\{ J(S - \alpha) + J_{bq} \left[2S^3 - 2S^2(1 + 5\alpha) + S(18\alpha^2 + 8\alpha + 1) \right. \right. \\ \left. \left. - 12\alpha^3 - 9\alpha^2 - 2\alpha \right] \right\} \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + \hat{I}_0 \right) \\ = \tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + \hat{I}_0 \right), \quad (2.10)$$

где је

$$\tilde{J}(\alpha) = J + J_{bq} \frac{2S^3 - 2S^2(1 + 5\alpha) + S(18\alpha^2 + 8\alpha + 1) - 12\alpha^3 - 9\alpha^2 - 2\alpha}{S - \alpha}, \quad (2.11)$$

а нови параметар $\alpha = n + a$ је уведен ради погодности. Константни чланови који су занемарени представљају класичну енергију основног стања за дводимензионалну решетку. Наш наредни задатак је да дијагонализујемо хамилтонијан. Суму по на-

јближим суседима можемо погодније написати као

$$H^{MF} = \frac{1}{2} \tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_{i,\delta} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_{i+\delta} + b_i^\dagger b_{i+\delta}^\dagger + b_i b_{i+\delta} \right), \quad (2.12)$$

где је $\delta \in \{(\pm 1, 0), (0 \pm 1)\}$ вектор између најближих чворова квадратне решетке. Сада можемо применити Фуријеову трансформацију на креационе и аничилационе операторе

$$\begin{aligned} H^{MF} &= \frac{1}{2} \tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \frac{1}{N} \sum_{i,\delta,k,k'} \left[e^{-ir_i(k-k')} b_k^\dagger b_{k'} + e^{-ir_i(k-k')} e^{-i\delta(k-k')} b_k^\dagger b_{k'} \right. \\ &\quad \left. + e^{-ir_i(k+k')} e^{-i\delta k'} b_k^\dagger b_{k'}^\dagger + e^{-ir_i(-k-k')} e^{i\delta k'} b_k b_{k'} \right] \\ &= \frac{1}{2} \tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_{\delta,k} \left[2b_k^\dagger b_k + e^{-i\delta k} b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + e^{i\delta k} b_k b_{-k} \right] \\ &= \tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_k \left[4b_k^\dagger b_k + (\cos k_a + \cos k_b) (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \right] \\ &= 4\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_{k>0} \left[b_k^\dagger b_k + b_{-k}^\dagger b_{-k} + \gamma_k (b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k}) \right], \end{aligned} \quad (2.13)$$

где је сума по четири најближа суседа

$$4\gamma_k = \sum_{\delta} e^{\pm i\delta k} = 2(\cos k_a + \cos k_b). \quad (2.14)$$

Сада трансформишимо хамилтонијан Боголљубовљевом трансформацијом

$$\begin{aligned} H^{MF} &= 4\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_{k>0} \left([\cosh 2\theta_k + \gamma_k \sinh 2\theta_k] (\beta_k^\dagger \beta_k + \beta_{-k}^\dagger \beta_{-k}) \right. \\ &\quad [\sinh 2\theta_k + \gamma_k \cosh 2\theta_k] (\beta_k^\dagger \beta_{-k}^\dagger + \beta_k \beta_{-k}) \\ &\quad \left. + 2 \sinh \theta_k^2 + \gamma_k \sinh 2\theta_k \right). \end{aligned} \quad (2.15)$$

Овај хамилтонијан је изражен помоћу нових бозонских креационих и аничилационих оператора β_k^\dagger и β_k . Како нам је циљ да дијагонализујемо хамилтонијан, префактор

испред недијагоналних оператора мора нестати. Због тога морамо фиксирати угао θ_k

$$\begin{aligned} \cosh 2\theta_k + \gamma_k \sinh 2\theta_k &= 0, \\ \tanh \theta_k &= -\gamma_k. \end{aligned} \quad (2.16)$$

Користећи тригонометријске трансформације имамо

$$\begin{aligned} \sinh^2 2\theta_k &= \frac{\gamma_k^2}{1 - \gamma_k^2}, \\ \sinh 2\theta_k &= \pm \frac{\gamma_k^2}{\sqrt{1 - \gamma_k^2}}. \end{aligned} \quad (2.17)$$

Константан члан представља енергију средњег поља

$$E^{MF} = \sum_k \left(\frac{\omega}{2} - 2\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \right) = 2\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \sum_k \left(\sqrt{1 - \gamma_k^2} - 1 \right). \quad (2.18)$$

Конечно, дијагонализовани хамилтонијан је

$$H^{MF} = \sum_k \omega_k \beta_k^\dagger \beta_k + E^{MF}. \quad (2.19)$$

Као што се и очекује, јављају се две Голдстонове моде јер је дошло до спонтаног нарушења симетрије: ексцитација без процепа за вектор $k = (1, 1)$ која представља Нелово стање и ексцитација за $k = (0, 0)$.

2.2 Самосагласност

Потребно је да одредимо вредност $\alpha = n - a$ самосагласно. Стога ћемо израчунати поправку енергије основног стања хамилтонијана за један чвор решетке у првом реду теорије пертурбације, где α третирамо као малу пертурбацију. Хамилтонијан H^{MF} можемо раздвојити на два дела $H = H_0 + \chi H_\chi$ где је χ мала пертурбација. Поправка

енергије основног стања по спину је дата са

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \chi} = \frac{1}{N} \frac{\partial}{\partial \chi} \langle 0 | H^{MF} | 0 \rangle = \langle 0 | H_\chi | 0 \rangle. \quad (2.20)$$

Ако изразимо по параметру α , добијамо

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha} &= \frac{1}{N} \langle 0 | \frac{\partial}{\partial \alpha} H^{MF} | 0 \rangle = \frac{1}{2} \sum_{\delta} \langle 0 | \hat{n}_i + \hat{n}_j + b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j | 0 \rangle \cdot \frac{\partial(\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha))}{\partial \alpha} \\ &= \sum_{\delta} \alpha \cdot \frac{\partial(\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha))}{\partial \alpha}. \end{aligned} \quad (2.21)$$

Дакле, α је одређено једначином

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha} = 4\alpha \frac{\partial(\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha))}{\partial \alpha}. \quad (2.22)$$

Користећи израз за енергију средњег поља по чвору у термодинамичком лимесу

$$\begin{aligned} \frac{1}{N} E^{MF} &= \frac{1}{(2\pi)^2} 2\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \iint_{BZ} d^2 k \left(\sqrt{1 - \gamma_k^2} - 1 \right) \\ &= \frac{1}{(2\pi)^2} 2\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha) \iint_{BZ} d^2 k \sqrt{1 + \frac{1}{4}(\cos k_a + \cos k_b)^2} - 2\tilde{J}(\alpha)(S - \alpha), \end{aligned} \quad (2.23)$$

изводимо једначину за α

$$\alpha = \frac{1}{2} \frac{1}{(2\pi)^2} \iint_{BZ} d^2 k \sqrt{1 + \frac{1}{4}(\cos k_a + \cos k_b)^2} - \frac{1}{2}, \quad (2.24)$$

где се интегарација врши по првој Брилуеновој зони.

2.3 Нумерички резултати

Да би се α одредило нумерички може се записати као

$$\alpha = \int_0^1 d\gamma \rho(\gamma) \sqrt{1 - \gamma^2} - \frac{1}{2} = \frac{2}{\pi^2} \int_0^1 d\gamma K\left(\sqrt{1 - \gamma^2}\right) \sqrt{1 - \gamma^2} - \frac{1}{2}, \quad (2.25)$$

где $\rho(\gamma)$ представља густину стања, а $K(x)$ потпуни елиптички интеграл прве врсте. Интеграција је урађена помоћу програма Mathematica и одређена је вредност за $S = 1$ [15]

$$\alpha = -0.0789737105. \quad (2.26)$$

Однос диперзија са биквадратном изменском интеракцијом и без ње је погодна величина која је дата са

$$\begin{aligned} \frac{\tilde{J}(\alpha)}{J} &= 1 + \nu \frac{2S^3 - 2S^2(1 + 5\alpha) + S(18\alpha^2 + 8\alpha + 1) - 12\alpha^3 - 9\alpha^2 - 2\alpha}{S - \alpha} \\ &= 1 + 1.277081189 \cdot \nu, \end{aligned} \quad (2.27)$$

где је $\nu = J_{bq}/J$. Добијена је линеарна зависност за коефицијентом 1.277081189.

Сада можемо упоредити добијени резултат са резултатима добијеним са друге две методе: егзактном дијагонализацијом (4×4) и развојем у ред [11]. У обе ове методе је рачуната енергија ексцитација као функција од импулса k за различите вредности ν . Максимуми ексцитационих енергија су пронађени за $k = (0.5, 0.5)$. Вредности које су добијене су: за егзактну дијагонализацију $\nu = 1.24505$; за развој у ред $\nu = 1.13423$.

Видимо да се резултат добијен у оквиру репрезентације Дајсон-Маљејева добро поклапа са резултатом добијеним егзактном дијагонализацијом. Одступање између резултата добијеног развојем у ред и помоћу репрезентације Дајсон-Маљејева је веће, али ипак прихватљиво. У три димензије би се добила боља апроксимација средњег поља.

Глава 3

Тродимензионална колинеарна фаза

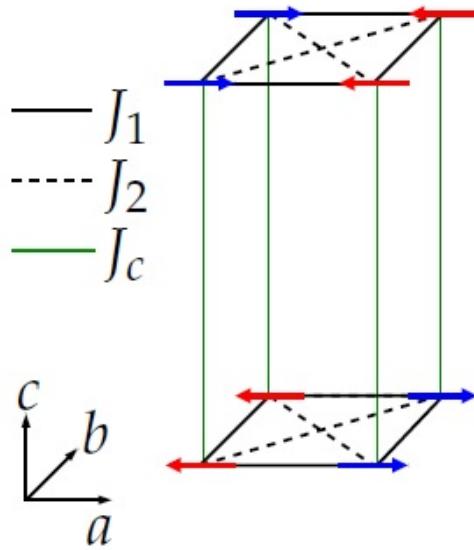
Фрустрирани Хајзенбергов модел у дводимензионалној колинеарној фази на апсолутној нули проширићемо на три димензије. У експериментима са расејањем неутрона, а на основу постојања брзине и дисперзије спинских таласа које су мерење у сва три правца a , b и c , откривен је тродимензионални карактер пниктида гвожђа [1, 18, 10]. Параметар изменске интеракције J_c између равни је антиферомагнетни и мањи од параметара J_1 и J_2 (слика 3.1). Такође, изменска интеракција између слојева ограничена је на најближе суседе.

Стога, проучаваћемо хамилтонијан

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_c \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j, \quad (3.1)$$

при чему су J_1 , J_2 , $J_c > 0$. Заградама $[i,j]$ је представљена интеракција између најближих суседа који припадају различитим равнима.

У правцу b , паралелно са спинским тракама, присутна је феромагнетна изменска интеракција. Потребно је у апроксимацији средњег поља одредити феромагнетну билинеарну измену. Потом ћемо дијагонализовати хамилтонијан, нумерички решити самоусаглашене једначине и израчунати посртајућу магнетизацију.



Слика 3.1: Тродимензионална колинеарна фаза са антиферомагнетном изменом између слојева

3.1 Модел

У овом моделу присутна су четири типа интеракције (веза). По једна веза за сваки од правца a , b и c и једна за следеће најближе суседе. Све интеракције су антиферомагнетне, осим оне у b -правцу која је феромагнетна. Дефинишемо следеће очекиване вредности:

1. средњи број попуњености по чвору решетке

$$n = \langle b_i^\dagger b_i \rangle = \langle b_j^\dagger b_j \rangle, \quad (3.2)$$

2. антиферомагнетна интеракција у правцу a

$$a_1 = \langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle = \langle b_i b_j \rangle, \quad (3.3)$$

3. антиферомагнетна интеракција у правцу c

$$a_c = \langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle = \langle b_i b_j \rangle, \quad (3.4)$$

4. антиферомагнетна интеракција у равни између следећих најближих суседа

$$a_2 = \langle b_i^\dagger b_j^\dagger \rangle = \langle b_i b_j \rangle, \quad (3.5)$$

5. феромагнетна интеракција у правцу b

$$f = \langle b_i^\dagger b_j \rangle = \langle b_j^\dagger b_i \rangle. \quad (3.6)$$

Претпостављамо да су све вредности реалне. Све остале очекиване вредности су једнаке нули. Скаларни производ спинских оператора у репрезентацији Дајсон-Маљејева за феромагнетну везу је

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j = S^2 - S \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j - b_i^\dagger b_j - b_j^\dagger b_i \right) + \hat{n}_i \hat{n}_j - \frac{1}{2} \left(b_i^\dagger \hat{n}_i b_j + b_j^\dagger \hat{n}_j b_i \right). \quad (3.7)$$

За Виково декупловање чланова четвртог степена се добија

$$\hat{n}_i \hat{n}_j = b_i^\dagger b_i b_j^\dagger b_j \approx n \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) + f \left(b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i \right) - n^2 - f^2, \quad (3.8a)$$

$$b_i^\dagger \hat{n}_i b_j = b_i^\dagger b_i^\dagger b_i b_j \approx 2n b_i^\dagger b_j + 2f b_i^\dagger b_i - 2nf, \quad (3.8b)$$

$$b_j^\dagger \hat{n}_j b_i = b_j^\dagger b_j^\dagger b_j b_i \approx 2n b_j^\dagger b_i + 2f b_j^\dagger b_j - 2nf. \quad (3.8c)$$

У априксимацији средњег поља феромагнетни билинеарни изменски члан је

$$\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \Big|_{MF} = - \left(S - (n - f) \right) \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j - b_i^\dagger b_j - b_j^\dagger b_i \right) + \text{const.} \quad (3.9)$$

Изостављањем константних чланова добијамо хамилтонијан средњег поља

$$\begin{aligned} H^{MF} = & \frac{J_1}{2} (S - \alpha_1) \sum_{i, \delta_a} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_{i+\delta_a} + b_i^\dagger b_{i+\delta_a}^\dagger + b_i b_{i+\delta_a} \right) \\ & - \frac{J_1}{2} (S - \beta) \sum_{i, \delta_b} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_{i+\delta_b} - b_i^\dagger b_{i+\delta_b} - b_{i+\delta_b}^\dagger b_i \right) \\ & + \frac{J_c}{2} (S - \alpha_c) \sum_{i, \delta_c} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_{i+\delta_c} + b_i^\dagger b_{i+\delta_c}^\dagger + b_i b_{i+\delta_c} \right) \\ & + \frac{J_2}{2} (S - \alpha_2) \sum_{i, \Delta} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_{i+\Delta} + b_i^\dagger b_{i+\Delta}^\dagger + b_i b_{i+\Delta} \right), \end{aligned} \quad (3.10)$$

за тродимензионалну колинеарну фазу. Дефинисани су нови параметри:

$$\alpha_1 = n + a_1, \quad \alpha_c = n + a_c, \quad \alpha_2 = n + a_2, \quad \beta = n - f. \quad (3.11)$$

Вектори δ_α , δ_β и δ_γ повезују најближе суседне чворове дуж одговарајућих правца, док вектор Δ повезује следеће најближе суседе унутар равни. Погодно је одредити Фуријеов трансформ хамилтонијана. У k -простору он гласи

$$\begin{aligned} H^{MF} = & \frac{J_1}{2}(S - \alpha_1) \sum_{k, \delta_a} \left(2b_k^\dagger b_k + e^{-i\delta_a k} b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + e^{i\delta_a k} b_k b_{-k} \right) \\ & - \frac{J_1}{2}(S - \beta) \sum_{k, \delta_b} \left(2 - e^{-i\delta_b k} - e^{i\delta_b k} \right) b_k^\dagger b_k \\ & + \frac{J_c}{2}(S - \alpha_c) \sum_{k, \delta_c} \left(2b_k^\dagger b_k + e^{-i\delta_c k} b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + e^{i\delta_c k} b_k b_{-k} \right) \\ & + \frac{J_2}{2}(S - \alpha_2) \sum_{k, \Delta} \left(2b_k^\dagger b_k + e^{-i} b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + e^i b_k b_{-k} \right). \end{aligned} \quad (3.12)$$

Сумирањем по векторима δ_i и Δ долазимо до израза

$$\sum_{\delta_i} e^{-i\delta_i k} = 2 \cos k_i \quad , \quad \sum_{\Delta} e^{-i\Delta k} = 4 \cos k_a \cos k_b. \quad (3.13)$$

Ради поједностављења уводимо ознаке A_k и B_k дефинисане као

$$A_k = 2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c) + J_1(S - \beta)(\cos k_b - 1), \quad (3.14a)$$

$$B_k = J_1(S - \alpha_1) \cos k_a + J_c(S - \alpha_c) \cos k_c + 2J_2(S - \alpha_2) \cos k_a \cos k_b. \quad (3.14b)$$

Сада можемо написати хамилтонијан

$$H^{MF} = \sum_{k>0} 2A_k \left(b_k^\dagger b_k + b_{-k}^\dagger b_{-k} \right) + \sum_{k>0} 2B_k \left(b_k^\dagger b_{-k}^\dagger + b_k b_{-k} \right). \quad (3.15)$$

Коришћењем Богольубовљеве трансформације долази се до облика

$$\begin{aligned} H^{MF} = & \sum_{k>0} 2[A_k \cosh 2\theta_k + B_k \sinh 2\theta_k] \left(\beta_k^\dagger \beta_k + \beta_{-k}^\dagger \beta_{-k} \right) \\ & + \sum_{k>0} 2[A_k \sinh 2\theta_k + B_k \cosh 2\theta_k] \left(\beta_k^\dagger \beta_{-k}^\dagger + \beta_k \beta_{-k} \right) \\ & + \sum_{k>0} 2[A_k \sinh \theta_k^2 + B_k \sinh 2\theta_k]. \end{aligned} \quad (3.16)$$

Да би се елиминисали вандијагонални чланови, погодно је фиксирати параметар θ_k

$$\tanh 2\theta_k = -\frac{B_k}{A_k}. \quad (3.17)$$

Дисперзија има облик

$$\omega_k = 2 \left[A_k \cosh 2\theta_k + B_k \sinh 2\theta_k \right] = 2 \sqrt{A_k^2 - B_k^2}, \quad (3.18)$$

где су искоришћене трансформације

$$\sinh 2\theta_k = -\frac{B_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}}, \quad \cosh 2\theta_k = \frac{A_k}{\sqrt{A_k^2 - B_k^2}}. \quad (3.19)$$

Члан који је константан сматра се енергијом средњег поља

$$E^{MF} = \sum_k \left(\sqrt{A_k^2 - B_k^2} - A_k \right). \quad (3.20)$$

Енергија средњег поља по спину у термалном лимесу је

$$\frac{1}{N} E^{MF} = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \left(\sqrt{A_k^2 - B_k^2} - A_k \right). \quad (3.21)$$

Дијагонални хамилтонијан средњег поља је сведен на

$$H^{MF} = \sum_k \omega_k \beta_k^\dagger \beta_k + E^{MF}. \quad (3.22)$$

Погодно је увести нове параметре који ће поједноставити нумеричке прорачуне

$$x = \frac{J_1}{J_2}, \quad (3.23a)$$

$$\mu = \frac{J_c}{J_1}. \quad (3.23b)$$

Дисперзија у јединицама J_2 гласи

$$\bar{\omega}_k = 2 \sqrt{\bar{A}_k - \bar{B}_k}, \quad (3.24)$$

где су

$$\bar{A}_k = 2(S - \alpha_2) + x(S - \alpha_1) + x\mu(S - \alpha_c) + x(S - \beta)(\cos k_b - 1), \quad (3.25a)$$

$$\bar{B}_k = x(S - \alpha_1) \cos k_a + x\mu(S - \alpha_c) \cos k_c + 2(S - \alpha_2) \cos k_a \cos k_b. \quad (3.25b)$$

3.2 Брзине спинских таласа

Развој дисперзионе релације за мале импулсе има облик

$$\omega_k^2 = v_a^2 k_a^2 + v_b^2 k_b^2 + v_c^2 k_c^2. \quad (3.26)$$

Брзине спинских таласа су

$$v_a = 2\sqrt{\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)\right]\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1)\right]}, \quad (3.27a)$$

$$v_b = 2\sqrt{\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)\right]\left[2J_2(S - \alpha_2) - J_1(S - \beta)\right]}, \quad (3.27b)$$

$$v_c = 2\sqrt{\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)\right]J_c(S - \alpha_c)}. \quad (3.27c)$$

Однос брзина у односу на v_a

$$\frac{v_b}{v_a} = \sqrt{\frac{2(S - \alpha_2) - x(S - \beta)}{2(S - \alpha_2) + x(S - \alpha_1)}}, \quad (3.28a)$$

$$\frac{v_c}{v_a} = \sqrt{\frac{x\mu(S - \alpha_c)}{2(S - \alpha_2) + x(S - \alpha_1)}}. \quad (3.28b)$$

Односи брзина спинских таласа су важне величине за фитовање модела.

3.3 Самосагласне једначине

Самосагласне једначине за параметре α_1 , α_2 , α_c и β су дате као

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha_1} = -2J_1\alpha_1, \quad (3.29a)$$

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha_2} = -4J_2 \alpha_2, \quad (3.29\alpha)$$

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha_c} = -2J_c \alpha_c, \quad (3.29\beta)$$

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \beta} = 2J_1 \beta. \quad (3.29\gamma)$$

Диференцирањем енергије средњег поља по спину, по параметрима, добија се скуп самосагласних једначина

$$\alpha_1 = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k - \bar{B}_k \cos k_a}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}, \quad (3.30\alpha)$$

$$\beta = -\frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k(\cos k_b - 1)}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}, \quad (3.30\beta)$$

$$\alpha_c = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k - \bar{B}_k \cos k_c}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}, \quad (3.30\beta)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k - \bar{B}_k \cos k_a \cos k_b}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}. \quad (3.30\gamma)$$

Бројоци су једнаки нули када диспезија не садржи процеп.

3.4 Посртајућа магнетизација

Посртајућа магнетизација је дефинисана као очекивана вредност спинског оператора

$$S_i^z$$

$$m_{st} = \langle S_i^z \rangle (-1)^\sigma, \quad (3.31)$$

где је $\sigma = 0$ за $i \in A$, а $\sigma = 1$ за $i \in B$. Пошто спинове из подрешетке B заротирамо за угао π око x -осе можемо писати

$$m_{st} = S - \langle \hat{n}_i \rangle. \quad (3.32)$$

Очекивана вредност за $n = \langle \hat{n}_i \rangle$ је дата као

$$n = \frac{1}{N} \sum_i \langle b_i^\dagger b_i \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \langle b_k^\dagger b_k \rangle$$

$$= \frac{1}{N} \sum_k \left\langle (\beta_k^\dagger \cosh \theta_k + \beta_{-k} \sinh \theta_k)(\beta_k \cosh \theta_k + \beta_{-k}^\dagger \sinh \theta_k) \right\rangle. \quad (3.33)$$

На апсолутној нули, израз који се јавља у угластим заградама је очекивана вредност основног стања, па се израз поједностављује

$$\begin{aligned} n &= \frac{1}{N} \sum_k \sinh^2 \theta_k = \frac{1}{2N} \sum_k \left(\sinh^2 \theta_k + \cosh^2 \theta_k + \sinh^2 \theta_k - \cosh^2 \theta_k \right) \\ &= \frac{1}{2N} \sum_k (\cosh 2\theta_k - 1). \end{aligned} \quad (3.34)$$

Посртајућа магнетизација у термодинамичком лимесу има облик

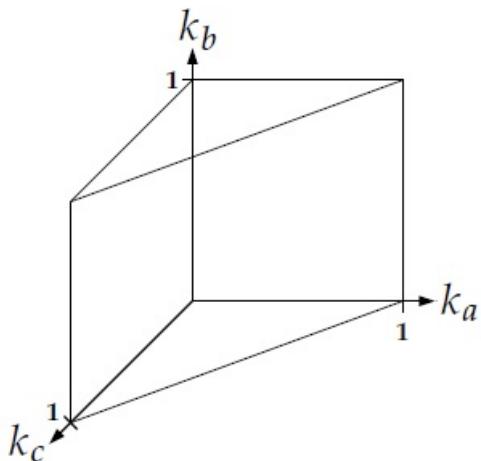
$$m_{st} = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3 k \frac{\bar{A}_k}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}}. \quad (3.35)$$

Подинтегрална величина дивергира у тачкама $k = (0, 0, 0)$ и $k = (1, 0, 1)$.

3.5 Нумерички резултати

Скуп самосагласних једначина као и једначина за посртајућу магнетизацију се морају решити нумерички. Вишедимензиони интеграли су растављени на поновљене једнодимензионе интеграле. Из разлога симетрије, интеграција по Брилуеновој зони је редукована на коцку $0 \leq k_a \leq 1$, $0 \leq k_b \leq 1$ и $0 \leq k_c \leq 1$. Такође, B_k^2 има тачкасту симетрију око $(0.5, k_b, 0.5)$ у равни $k_a - k_c$ тако да интеграција по k_c може бити ограничена на $0 \leq k_c \leq (1 - k_a)$. Област интеграције је приказана на слици 3.2. За решавање система нелинеарних једначина коришћен је Бројденов метод.

Програм започиње интеграцију која је редукована на две димензије. Узима вредност $x = 0$ у дводимензионалној колинеарној фази, где је $\alpha_1 = \alpha_c = \beta = n$. Пошто је величина који се интеграли пропорционална са $(\cos k_a \cdot \cos k_b)^2$, интеграцију по k_a и k_b је довољно извршити од 0 до 0.5. Интеграл за параметар α_2 конвергира, док за остале параметре и за посртајућу магнетизацију дивергира у тачки $(0, 0)$, па је потребно развити и интегрисати аналитички око те тачке. Детаљан поступак се налази у Додатку A.1.



Слика 3.2: Област интеграције

Након овог поступка, фрустрација x се сукцесивно повећава за вредност 10^{-3} . Прво се одређују параметри α_1 , α_2 , α_c и β Бројденовим методом. Интеграли у самосагласним једначинама не дивергирају и могу се израчунати. Посртајућа магнетизација се мора израчунати нумеричком интеграцијом. За разлику од интеграције у две димензије, овде се и интеграција развоја мора урадити нумерички. Поступак се налази у Додатку А.2.

Израчунавања се завршавају у неколико случајева: када магнетизација више не може бити израчуната, када програм прекорачи унапред дефинисани број корака, када дође до унапред дефинисане максималне вредности за фрустрацију или када брзина спинског таласа v_b опадне до нуле.

За вредност параметра $\mu = 0$, резултати морају бити исти као они коју су добијени у колинеарној фази у две димензије. Резултати за Нелову фазу у две и три димензије су добијени у случају без фрустрације и када су све изменске константе једнаке. То имплицира и да дводимензионални резултат не сме зависити од избора равни.

3.6 Резултати и дискусија

У овом одељку ће бити представљени резултати за $S = 1$ и различите вредности параметра μ . Потребно је дефинисати критичну тачку као тачку у којој теорија спинских таласа престаје да важи. Као што је познато, врло је тешко доћи у

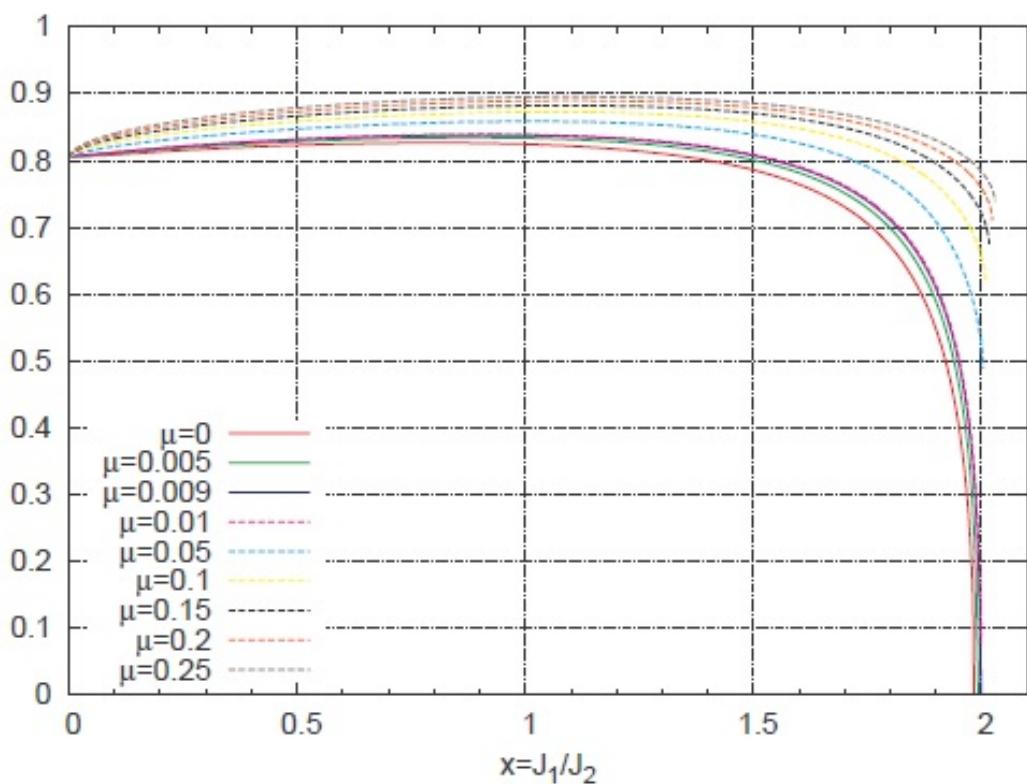
непосредну близину критичне тачке. У тој тачки тродимензионална колинеарна фаза доживљава колапс, а узрок су два различита сценарија.

По првом сценарију брзине спинских таласа задржавају коначне вредности, док посртajuћа магнетизација нестаје. Тада сценарио ћемо називати *сценарио вођен магнетизацијом* (на графицима представљен пуним линијама). По другом сценарију брзина спинских таласа v_b прво нестаје, док посртajuћа магнетизација увек задржава коначне вредности. Тада сценарио ћемо звати *сценарио вођен брзином* (на графицима представљен испрекиданим линијама). У зависности од вредности константе спрезања μ и вредности спина S долази се до једног или другог сценарија.

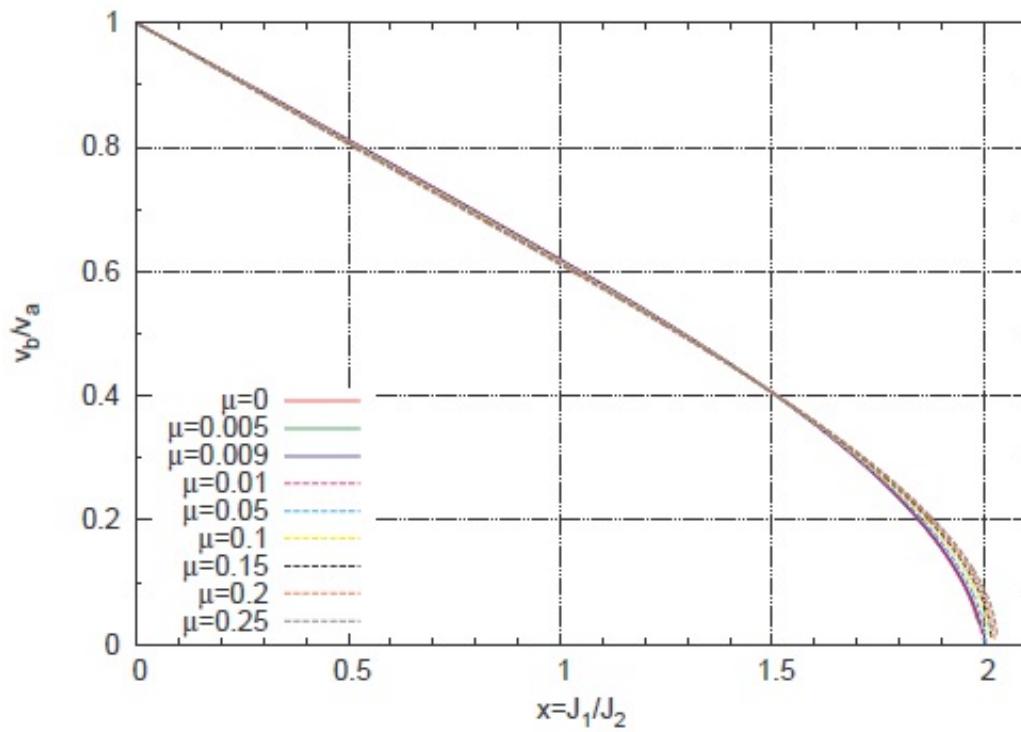
На слици 3.3 види се да је посртajuћа магнетизација углавном константна. Када се параметар фрустрације x приближава критичној вредности, посртajuћа магнетизација је само ренормализована.

Односи v_b/v_a и v_c/v_a су приказани на слици 3.4. Однос v_b/v_a опада скоро линеарно. Као што се очекује на основу једначине (3.28б) однос v_c/v_a је сразмеран квадратном корену параметара x и μ . Са графика се види да се прелаз између сценарија вођеног магнетизацијом и сценарија вођеног брзином догађа за вредност $\mu \approx 0.01$.

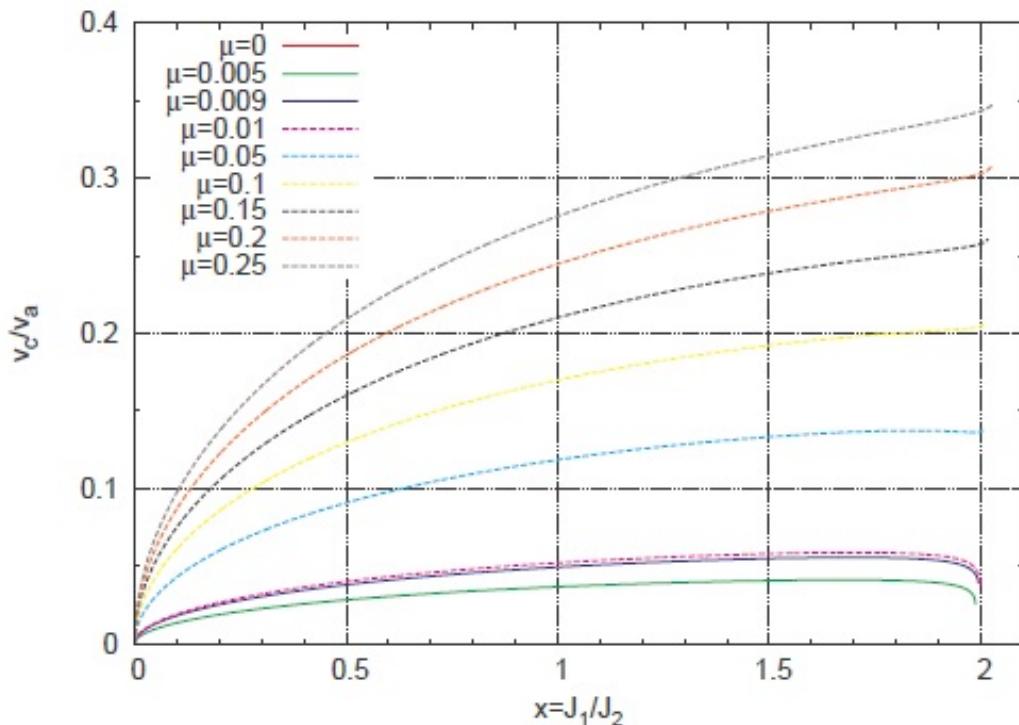
На slikama 3.5 и 3.6 приказани су графици ренормализације изменских константи од параметра фрустрације x . Изменска константа ортогонална на спинске траке монотоно расте и врло је стабилна, док је изменска константа паралелна са спинским тракама ренормализована што се види по томе да брзина спинских таласа v_b опада на нулу у сценарију вођеном брзином. Константа измене између слојева је ренормализована за мале вредности μ , док за веће вредности тог параметра постаје све ближа константној функцији. Изменска интеракција између следећих најближих суседа је такође врло ренормализована са порастом вредности x као што се и очекује.



Слика 3.3: Посртажућа магнетизација за вредност спина $S = 1$.

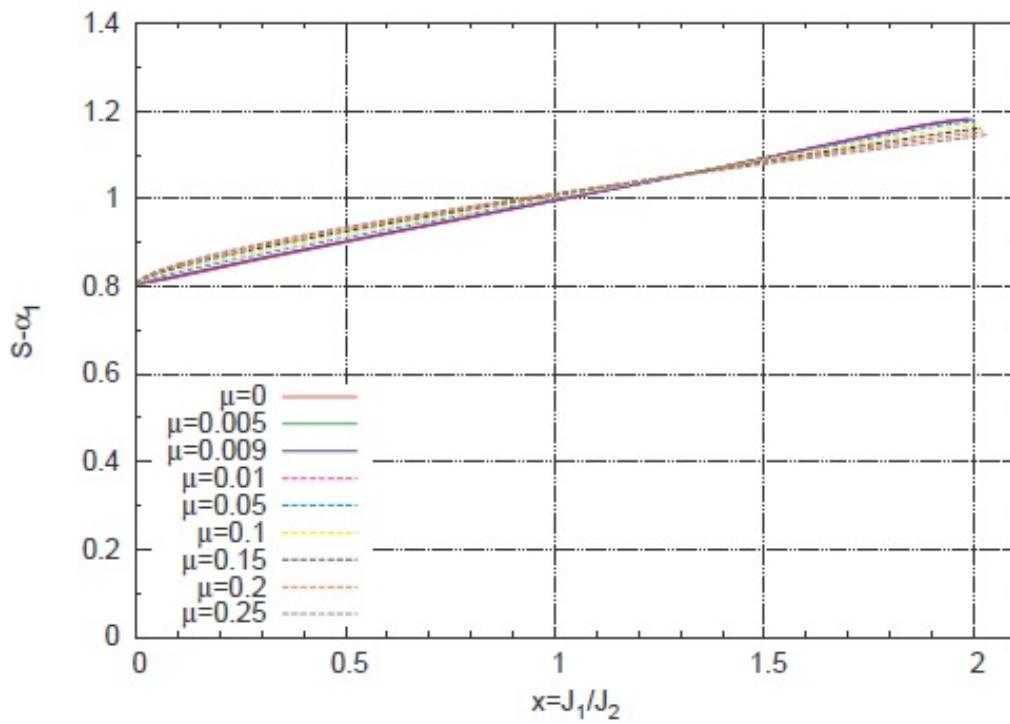


(а) Однос брзина спинских таласа v_b/v_a у зависности од x

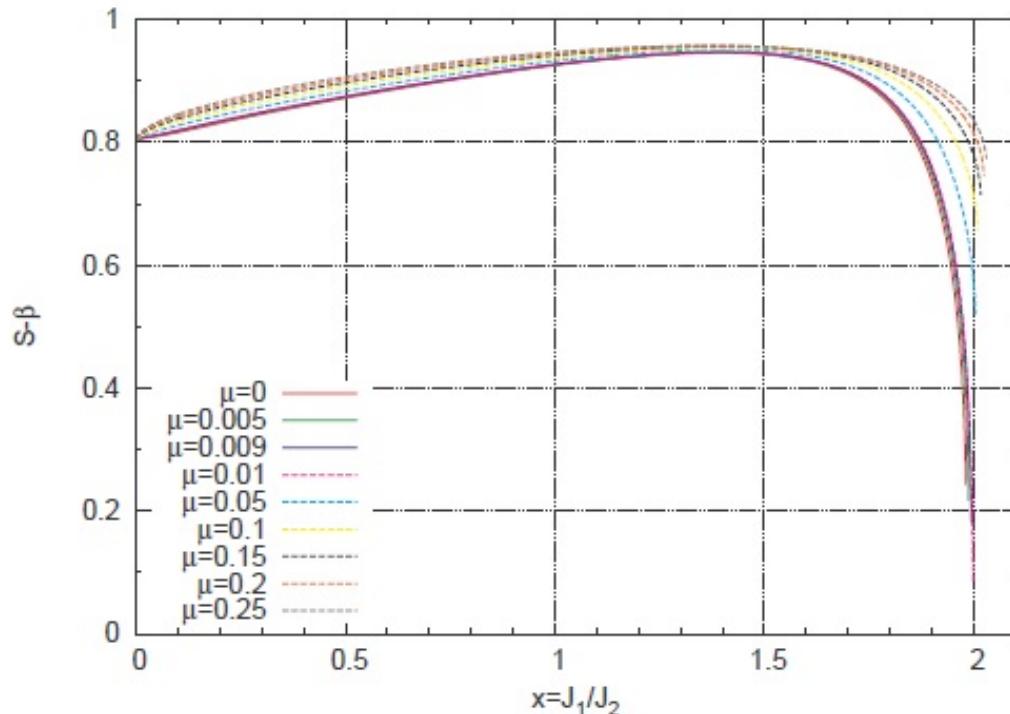


(б) Однос брзина спинских таласа v_c/v_a у зависности од x

Слика 3.4: Однос брзина спинских таласа за вредност спина $S = 1$.

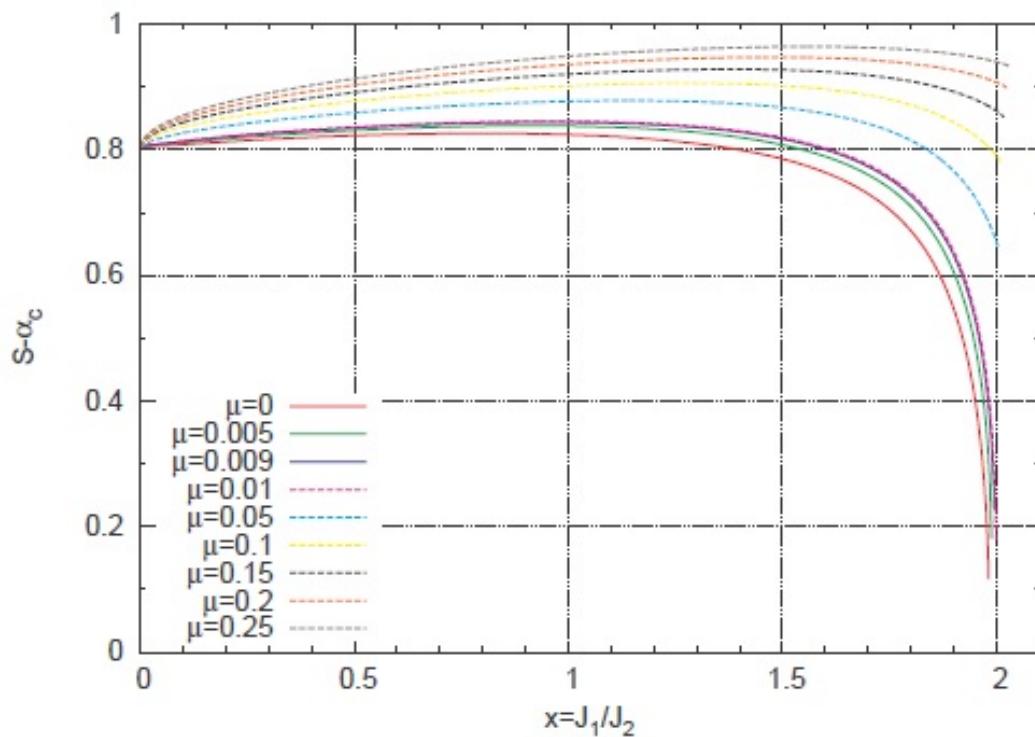


(a) Ренормализација изменске константе ортогонално на спинске траке

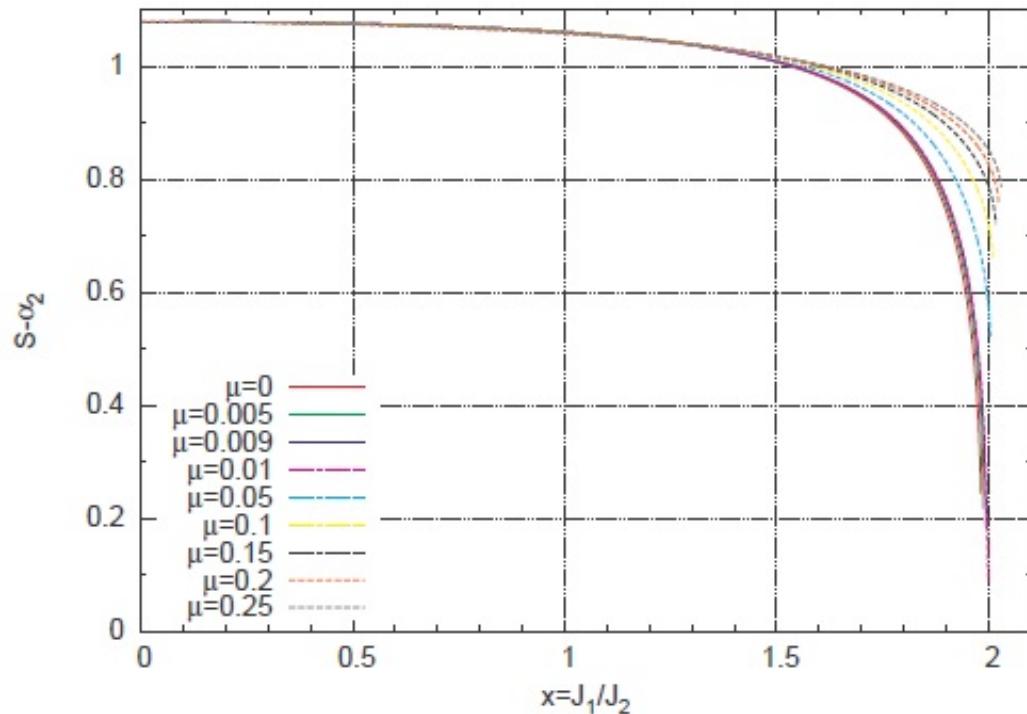


(б) Ренормализација изменске константе паралелно са спинским тракама

Слика 3.5: Ренормализација изменских константи за вредност спина $S = 1$.



(a) Ренормализација изменске константе између слојева



(б) Ренормализација изменске константе између следећих најближих суседа

Слика 3.6: Ренормализација изменских константи за вредност спина $S = 1$.

Глава 4

Тродимензионална колинеарна фаза са биквадратном изменом

У овом поглављу ћемо хамилтонијану (3.1) који смо проучавали у претходном поглављу додати још један члан - биквадратни. Овај члан у Хајзенберговом моделу за системе са спином $S \geq 1$ заједно са билинеарним члановима уводи анизотропију у ефективну изменску константу [15]. Пниктиди гвожђа подлежу структурном фазном прелазу ка орторомбичној структури. У експериментима је показано да је тај утицај на анизотропију мали. Може се претпоставити да је аанизотропија узрокована биквадратном изменом.

Проучавамо хамилтонијан облика

$$H = J_1 \sum_{\langle i,j \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle i,j \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_c \sum_{[i,j]} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j - J_{bq} \sum_{\langle i,j \rangle} (\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j)^2, \quad (4.1)$$

где је J_{bq} параметар биквадратне изменске интеракције у равни. Поншто смо биквадратну измену већ проучавали у Глави 2 за Нелову фазу, преостаје нам да декуплујемо феромагнетну изменску интеракцију паралелну са спинским тракама.

4.1 Модел

На основу декупловања биквадратне изменске интеракције у репрезентацији Дајсон-Маљејева у Глави 2, хамилтонијан средњег поља за најближе суседне чворове ортогоналан на спинске траке је

$$H_{\perp}^{MF} = J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + b_i^\dagger b_j^\dagger + b_i b_j \right), \quad (4.2)$$

Ознака J_{1a} представља

$$J_{1a} = J_1 + J_{bq} \frac{2S^3 - 2S^2(1 + 5\alpha_1) + S(18\alpha_1^2 + 8\alpha_1 + 1) - 12\alpha_1^3 - 9\alpha_1^2 - 2\alpha_1}{S - \alpha_1}. \quad (4.3)$$

Уводимо декупловање феромагнетне интеракције паралелне са спинским тракама.

Биквадратни члан има облик

$$\begin{aligned} \left. \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \right)^2 \right|_{||} &= S^4 - 2S^3 \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j - \hat{F}_0 \right) \\ &+ S^2 \left[\hat{n}_i^2 + \hat{n}_j^2 + 4\hat{n}_i \hat{n}_j + \hat{F}_0^2 - \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) \hat{F}_0 - \hat{F}_0 \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) - \hat{F}'_0 \right] \\ &+ S \left[-2 \left(\hat{n}_i \hat{n}_j^2 + \hat{n}_i^2 \hat{n}_j \right) + \hat{n}_i \hat{n}_j \hat{F}_0 + \hat{F}_0 \hat{n}_i \hat{n}_j \right. \\ &\quad \left. + \frac{1}{2} \left(-\hat{F}_0 \hat{F}'_0 - \hat{F}'_0 \hat{F}_0 + \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) \hat{F}'_0 + \hat{F}'_0 \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j \right) \right) \right] \\ &+ \hat{n}_i^2 \hat{n}_j^2 + \frac{1}{4} \hat{F}'_0^2 - \frac{1}{2} \left(\hat{n}_i \hat{n}_j \hat{F}'_0 + \hat{F}'_0 \hat{n}_i \hat{n}_j \right), \end{aligned} \quad (4.4)$$

где су

$$\hat{F}_0 = b_i^\dagger b_j + b_j^\dagger b_i \quad \text{и} \quad \hat{F}'_0 = b_i^\dagger \hat{n}_i b_j + b_j^\dagger \hat{n}_j b_i. \quad (4.5)$$

Примењујемо Викову теорему на све чланове реда S^2 и ниже. Биквадратна измена се декуплује као

$$\begin{aligned} \left. \left(\mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \right)^2 \right|^{MF} &= - \left[2S^3 - 2S^2(1 + 5\beta) + S(18\beta^2 + 8\beta) - 12\beta^3 - 9\beta^2 - \beta \right] \\ &\quad \cdot \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j - \hat{F}_0 \right) + \text{const.} \end{aligned} \quad (4.6)$$

Декупловани чланови антиферомагнетне и феромагнетне интеракције су врло слични. У случају феромагнета, у члану $S(18\beta^2 + 8\beta)$ у загради недостаје члан $+1$, док последњи члан у загради нема коефицијент 2 .

За билинеарну и биквадратну измену, репрезентација Дајсон-Маљеве даје егзактан резултат

$$\Delta E = JS + J_{bq}(2S^3 - 2S^2), \quad (4.7)$$

за везу са једном ексцитацијом. Заменом декупловане билинеарне и биквадратне изменске интеракције, добија се хамилтонијан средњег поља за феромагнетну измену паралелну са спинским тракама

$$H_{\parallel}^{MF} = J_{1b}(\beta)(S - \beta) \sum_{\langle i,j \rangle} \left(\hat{n}_i + \hat{n}_j + b_i^\dagger b_j - b_j^\dagger b_i \right), \quad (4.8)$$

где је J_{1b}

$$J_{1b}(\beta) = J_1 + J_{bq} \frac{2S^3 - 2S^2(1 + 5\beta) + S(18\beta^2 + 8\beta) - 12\beta^3 - 9\beta^2 - \beta}{S - \beta}. \quad (4.9)$$

Сада можемо написати дијагонализовани хамилтонијан

$$H^{MF} = \sum_k \omega_k \beta_k^\dagger \beta_k + E^{MF}, \quad (4.10)$$

Где су

$$\omega_k = 2\sqrt{A_k^2 - B_k^2}, \quad (4.11)$$

дисперзиона релација и

$$E^{MF} = \sum_k \left(\sqrt{A_k^2 - B_k^2} - A_k \right) \quad (4.12)$$

енергија средњег поља, а параметри A_k и B_k дати као

$$A_k = 2J_2(S - \alpha_2) + J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c) + J_{1b}(\beta)(S - \beta)(\cos k_b - 1), \quad (4.13a)$$

$$B_k = J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) \cos k_a + J_c(\alpha_c)(S - \alpha_c) \cos k_c + 2J_2(S - \alpha_2) \cos k_a \cos k_b. \quad (4.13b)$$

Голдстонове моде се налазе у $(0,0,0)$ и $(1,0,1)$. Погодно је изразити све величине у јединицама J_2 . Нове изменске константе имају облик

$$x_{1a}(\alpha_1) = x + x\nu \frac{2S^3 - 2S^2(1 + 5\alpha_1) + S(18\alpha_1^2 + 8\alpha_1 + 1) - 12\alpha_1^3 - 9\alpha_1^2 - 2\alpha_1}{S - \alpha_1}, \quad (4.14a)$$

$$x_{1b}(\beta) = x + x\nu \frac{2S^3 - 2S^2(1 + 5\beta) + S(18\beta^2 + 8\beta) - 12\beta^3 - 9\beta^2 - \beta}{S - \beta}, \quad (4.14b)$$

где је уведено

$$\nu = \frac{J_{bq}}{J_1}. \quad (4.15)$$

Параметри A_k и B_k су замењени са

$$\bar{A}_k = 2(S - \alpha_2) + x_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) + x\mu(S - \alpha_c) + x_{1b}(\beta)(S - \beta)(\cos k_b - 1), \quad (4.16a)$$

$$\bar{B}_k = x_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) \cos k_a + x\mu(\alpha_c)(S - \alpha_c) \cos k_c + 2(S - \alpha_2) \cos k_a \cos k_b. \quad (4.16b)$$

Брзине спинских таласа добијене су заменом изменске константе J_1 у једначинама (3.27) ефективним константама $J_{1a}(\alpha)$ и $J_{1b}(\beta)$

$$v_a = 2\sqrt{\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)\right]\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1)\right]}, \quad (4.17)$$

$$v_b = 2\sqrt{\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)\right]\left[2J_2(S - \alpha_2) - J_{1b}(\beta)(S - \beta)\right]}, \quad (4.18)$$

$$v_c = 2\sqrt{\left[2J_2(S - \alpha_2) + J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)\right]J_c(S - \alpha_c)}. \quad (4.19)$$

Однос брзина у односу на v_a

$$\frac{v_b}{v_a} = \sqrt{\frac{2(S - \alpha_2) - x_{1b}(\beta)(S - \beta)}{2(S - \alpha_2) + x_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1)}}, \quad (4.20a)$$

$$\frac{v_c}{v_a} = \sqrt{\frac{x\mu(S - \alpha_c)}{2(S - \alpha_2) + x_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1)}}. \quad (4.20b)$$

4.2 Самосагласне једначине и посртажућа магнетизација

Самосагласне једначине су непромењене, само су сада ефективне изменске константе функције параметара. Самосагласне једначине за α_1 и β_1 су

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha_1} = -2\alpha_1 \frac{\partial}{\partial \alpha_1} (J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1)), \quad (4.21a)$$

$$\frac{1}{N} \frac{\partial E^{MF}}{\partial \alpha_1} = 2J_1\beta \frac{\partial}{\partial \alpha_1} (J_{1b}(\beta)(S - \beta)), \quad (4.21b)$$

док су једначине за остале два параметра непромењене. Потпун скуп самосагласних једначина гласи

$$\alpha_1 = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k - \bar{B}_k \cos k_a}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}, \quad (4.22a)$$

$$\beta = -\frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k (\cos k_b - 1)}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}, \quad (4.22b)$$

$$\alpha_c = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k - \bar{B}_k \cos k_c}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}, \quad (4.22c)$$

$$\alpha_2 = \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k - \bar{B}_k \cos k_a \cos k_b}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} - \frac{1}{2}. \quad (4.22d)$$

Посртажућа магнетизација за модел са биквадратном изменом је

$$m_{st} = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2(2\pi)^3} \iiint_{BZ} d^3k \frac{\bar{A}_k}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}}. \quad (4.23)$$

Назначено је да се интеграција врши по првој Брилуеновој зони.

4.3 Нумерички резултати

У нумеричким прорачунима узете су вредности $S = 1$ и $\mu = 0.25$. На слици 4.1, приказан је график зависности посртажуће магнетизације од параметра x . Током извођења нумеричких прорачуна параметре μ и ν фиксирамо, а фрустрацију x повећавамо,

односно смањујемо почевши од нуле. Утицај биквадратне изменске интеракције дестабилизује колинеарну фазу, па је критична тачка померена ка мањим вредностима x . Постоји и врло мали утицај на максималну вредност посртажуће магнетизације.

Утицај биквадратне интеракције на изменске константе приказан је на слици 4.2. На основу графика, примећује се снажан утицај на изменску интеракцију ортогоналну на спинске траке, док је утицај на изменску интеракцију паралелну спинским тракама практично занемарљив. На графицима на слици 4.3 види се да биквадратна интеракција утиче на интеракцију између слојева и на интеракцију између следећих најближих суседа само тако што се вредност критичне температуре помера ка мањим вредностима x . То је и очекивано јер је биквадратна интеракција у хамилтонијану уведена само за најближе суседе у истој равни.

Ефективне изменске константе за тродимензионалну колинеарну фазу са биквадратном изменом имају облик

$$\tilde{J}_{1a} = J_{1a}(\alpha_1)(S - \alpha_1), \quad (4.24a)$$

$$\tilde{J}_{1b} = J_{1b}(\beta)(S - \beta), \quad (4.24b)$$

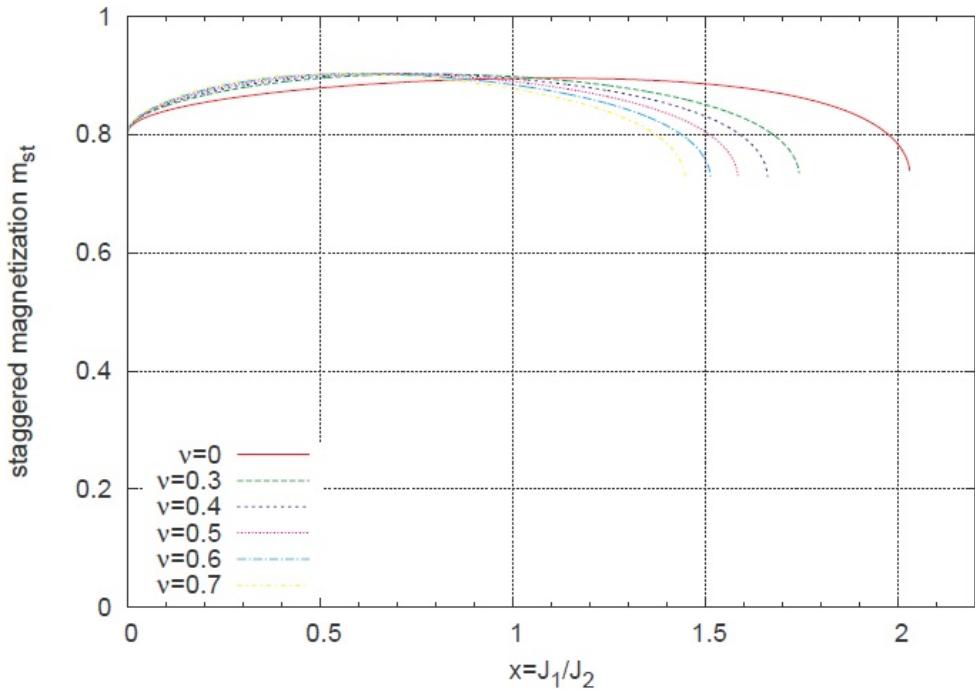
$$\tilde{J}_c = J_c(S - \alpha_c), \quad (4.24c)$$

$$\tilde{J}_2 = J_2(S - \alpha_2). \quad (4.24d)$$

На слици 4.4, приказана је зависност ефективних изменских константи у правицма a и b . Због постојања биквадратног члана интеракција ортогонално на спинске траке је појачана, док је интеракција паралелно са спинским тракама само благо померена.

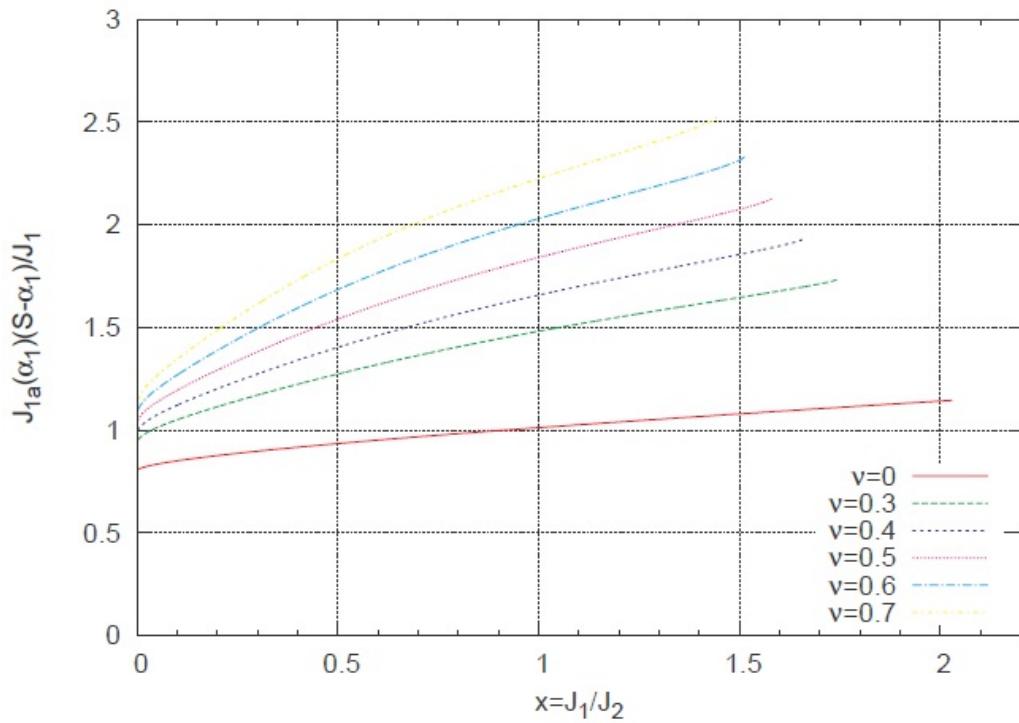
Однос брзина спинских таласа је врло сличан оном без биквадратне изменске интеракције (слика 4.5). Примећује се благи пад вредности као последица повећања брзине v_a услед јачања изменске интеракције ортогонално на спинске траке.

На слици 4.6 приказана је дисперзија спинских таласа. Дуж правца a и c максималне вредности дисперзије расту са порастом биквадратне изменске интеракције. Облик функција остаје непромењен. Ако посматрамо дисперзију дуж правца b ,

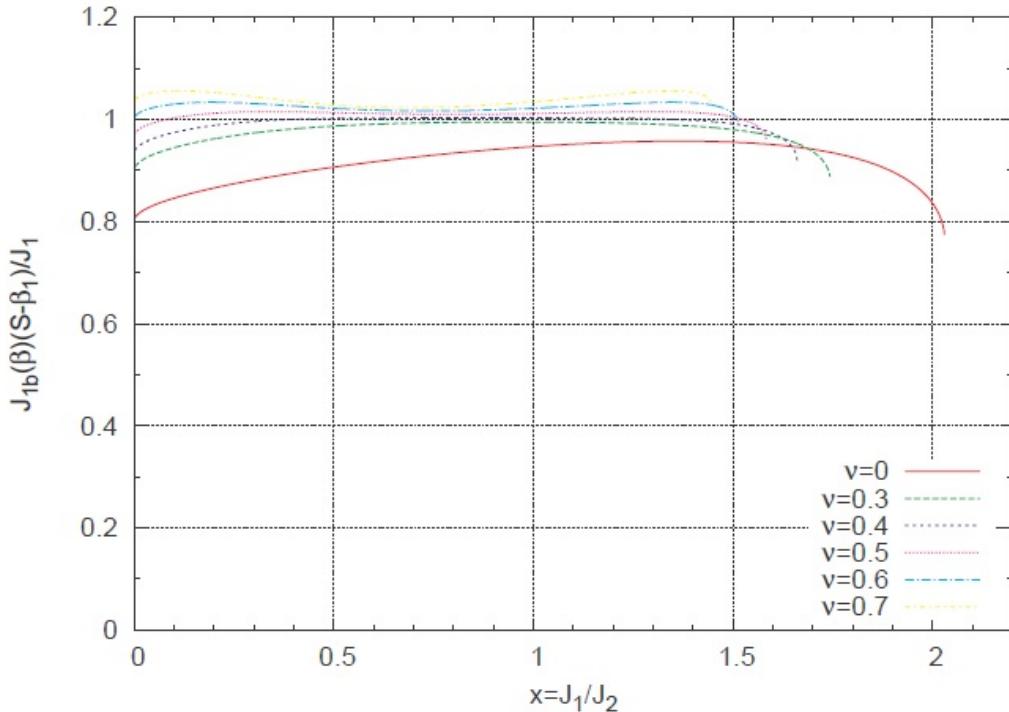


Слика 4.1: Посртјућа магнетизација у зависности од параметра x за $S = 1$ и $\mu = 0.25$.

налазимо да се локални минимум за $k = (0, 1, 0)$ померио навише. Компонента A_k има свој максимум у $k = (0, 1, 0)$ и за $\tilde{J}_{1b} < 0$, што одговара феромагнетној изменаме. Ефективна феромагнетна измена паралелна са спинским тракама имплицира нефрустрирани магнетизам.

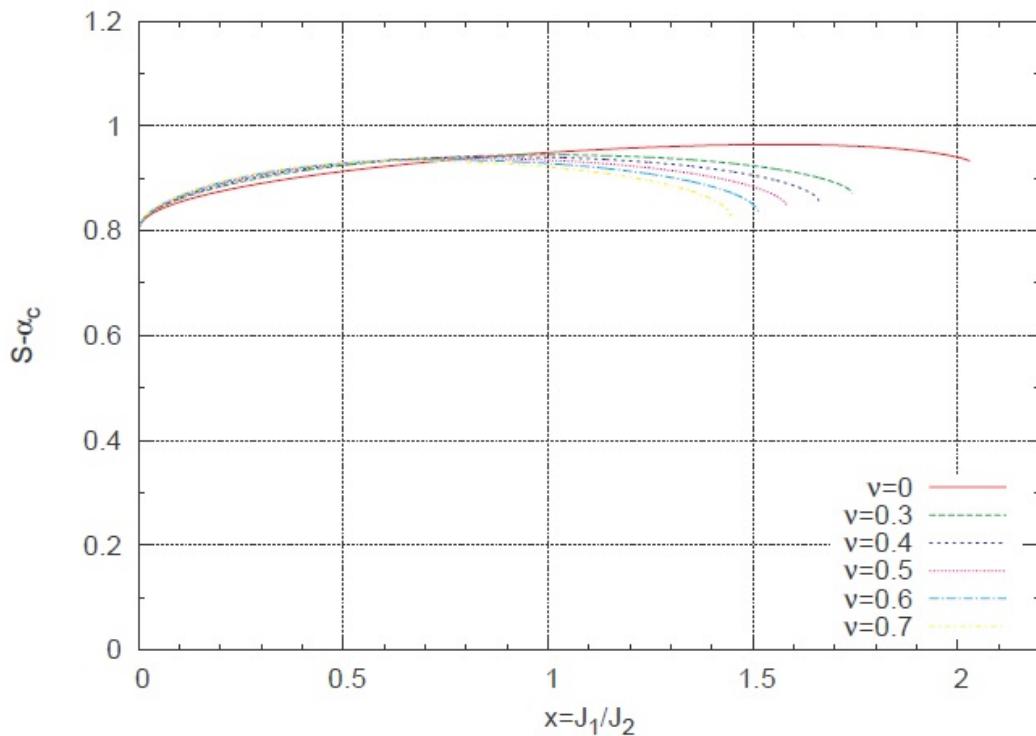


(a) Ренормализација измене ортогоналне на спинске траке

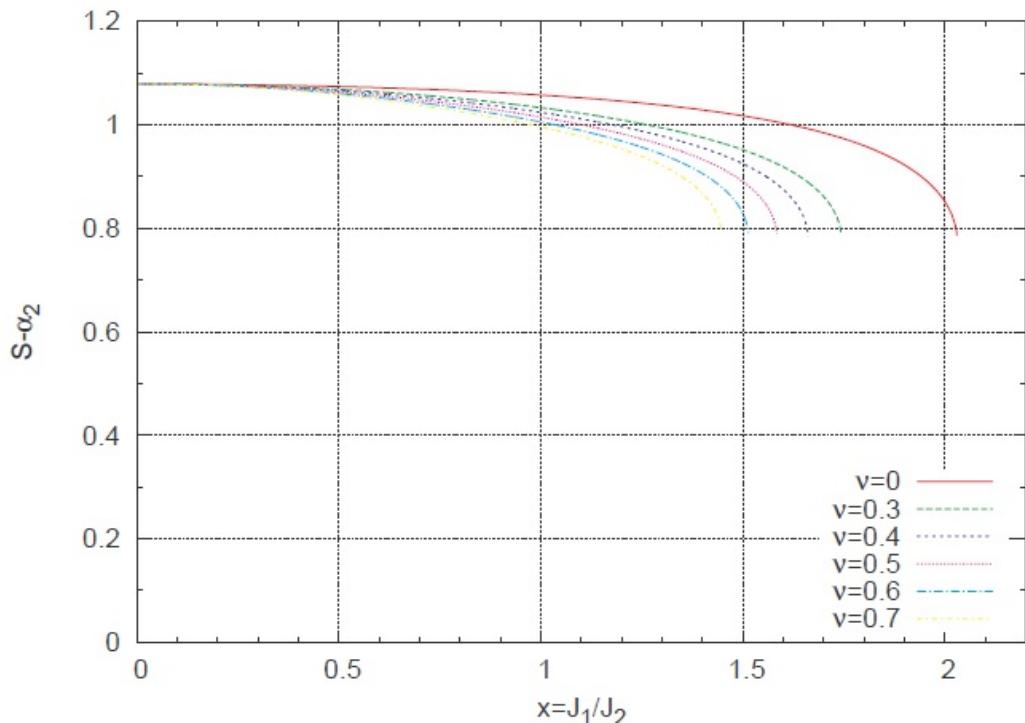


(б) Ренормализација измене паралелне са спинским тракама

Слика 4.2: Ренормализација због квантних флуктуација у зависности од параметра x за $S = 1$ и $\mu = 0.25$.

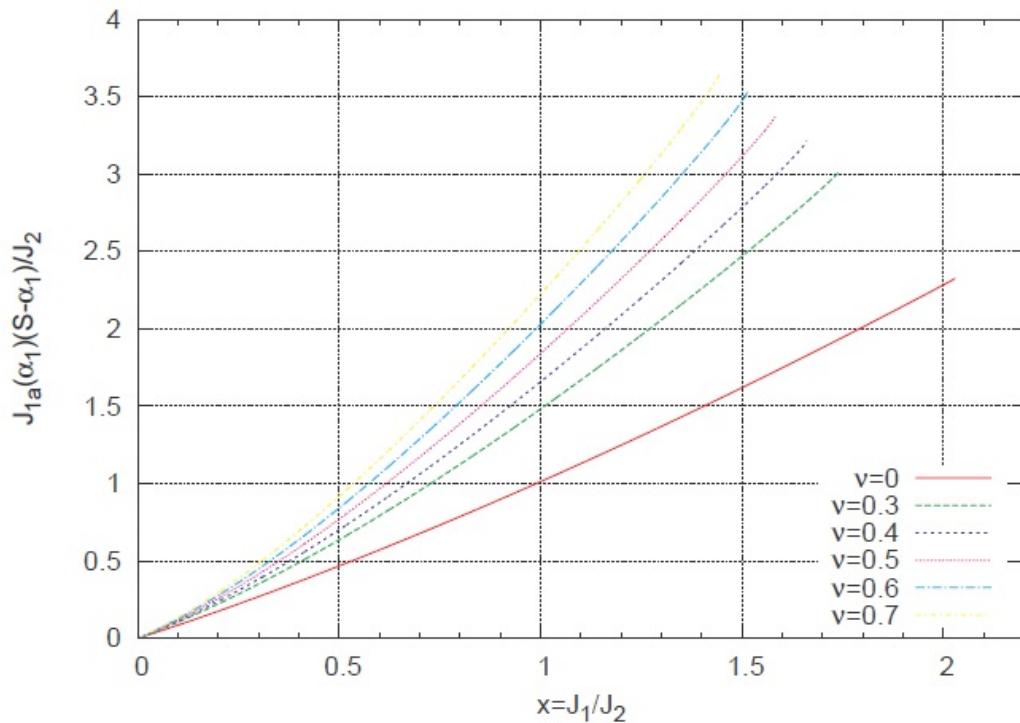


(a) Ренормализација измене између слојева

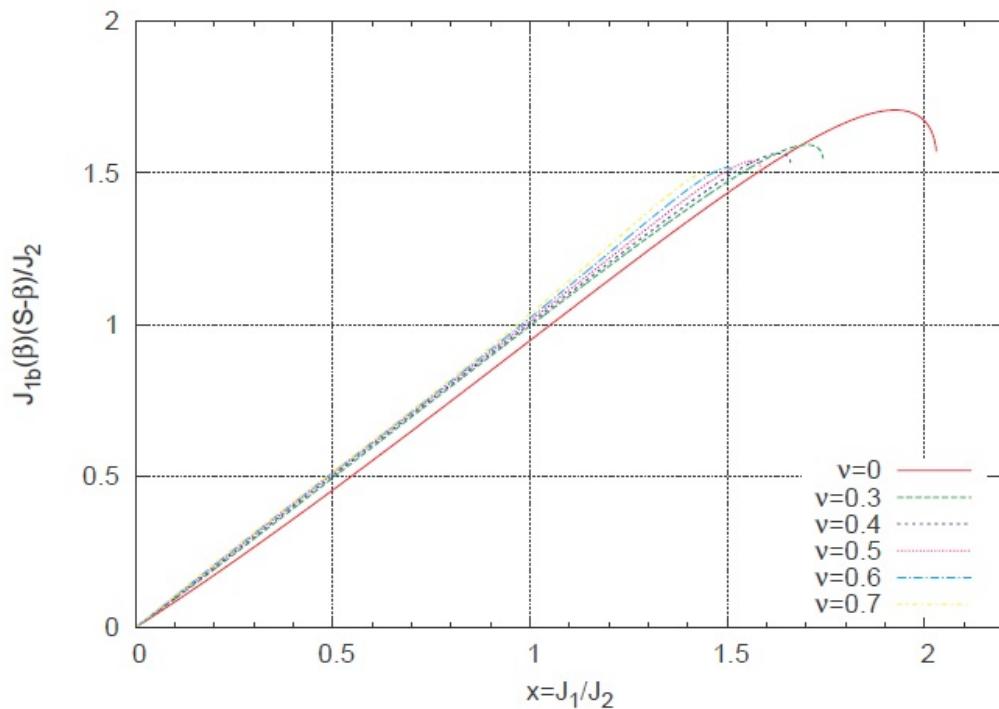


(б) Ренормализација измене између следећих најближих суседа

Слика 4.3: Ренормализација због квантних флуктуација у зависности од параметра x за $S = 1$ и $\mu = 0.25$.

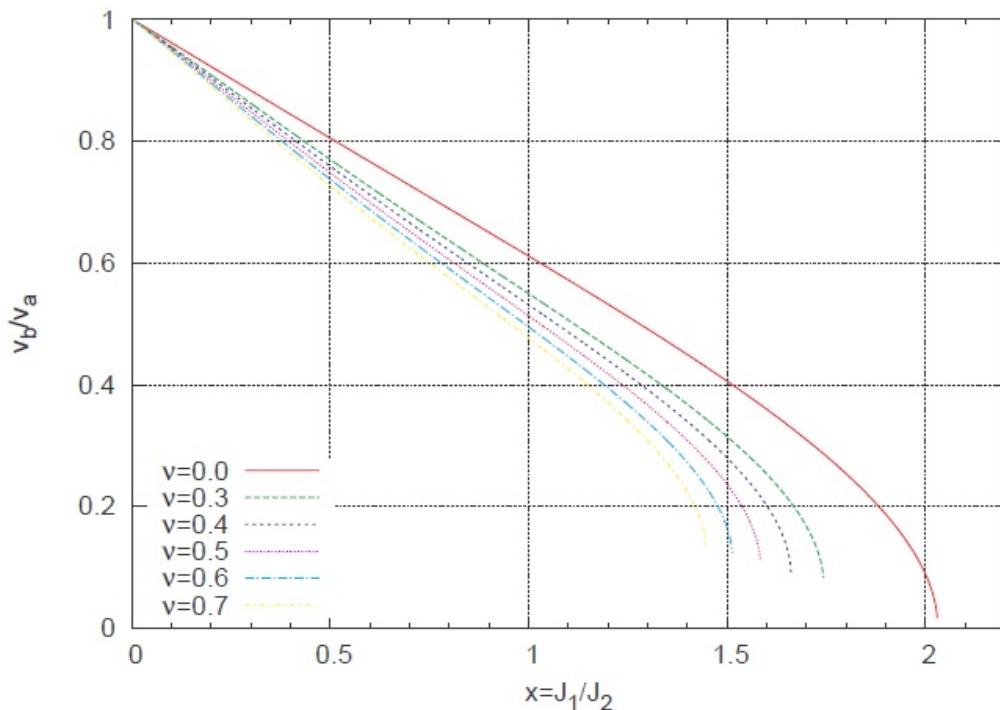


(а) Ортогонално на спинске траке

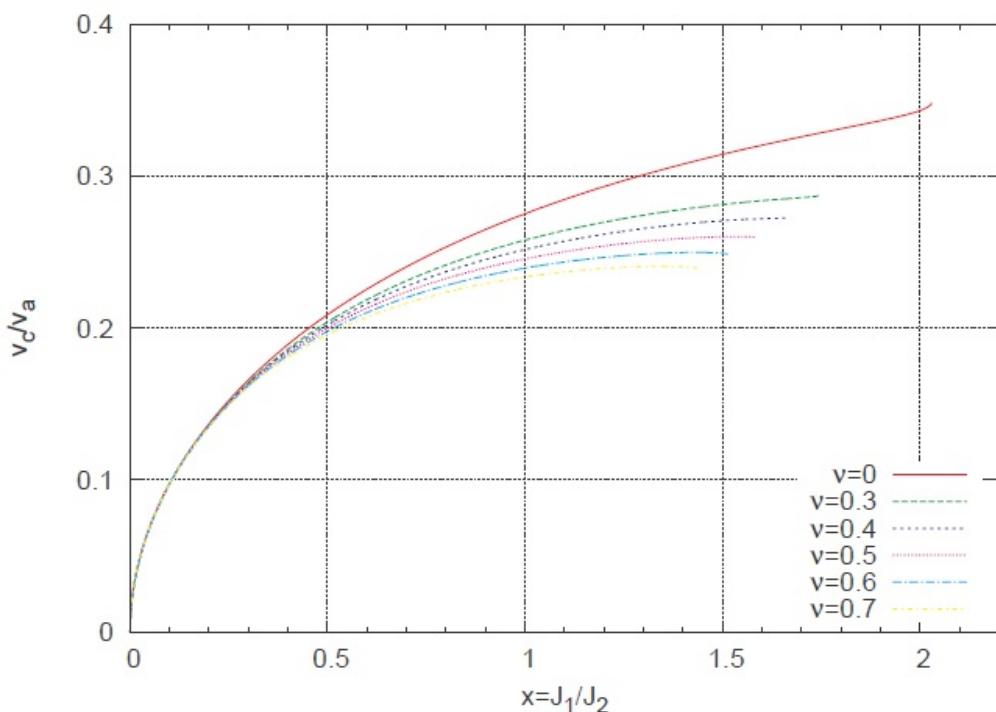


(б) Паралелне са спинским тракама

Слика 4.4: Ефективне изменске константе у равни у јединицама J_2 у зависности од параметра x за $S = 1$ и $\mu = 0.25$.

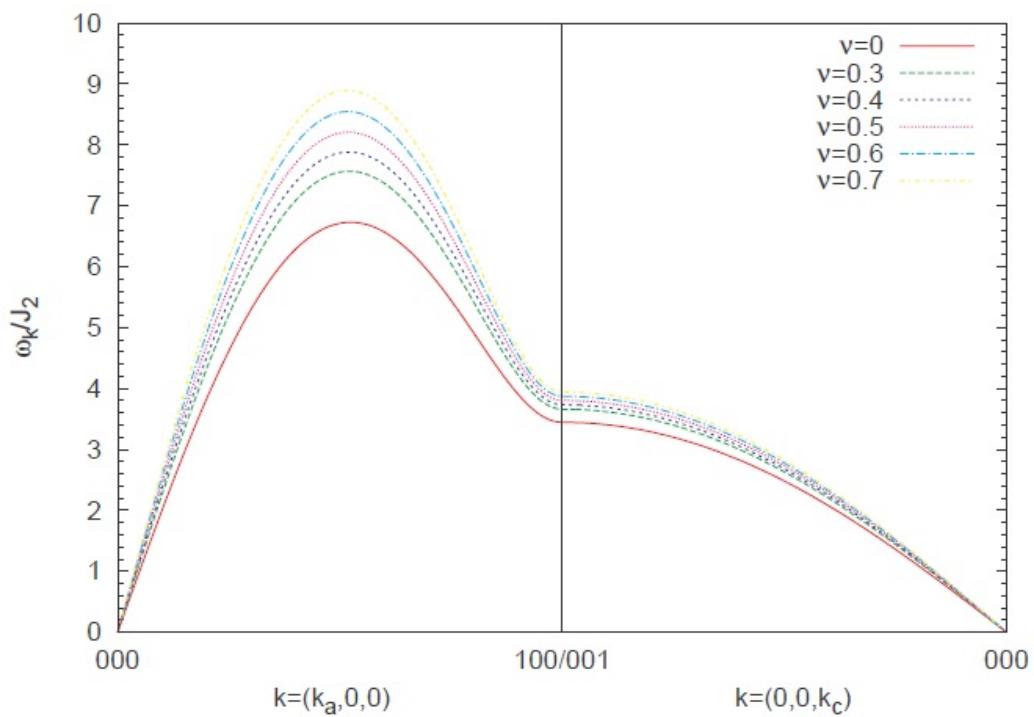


(а) Однос брзина v_b/v_a

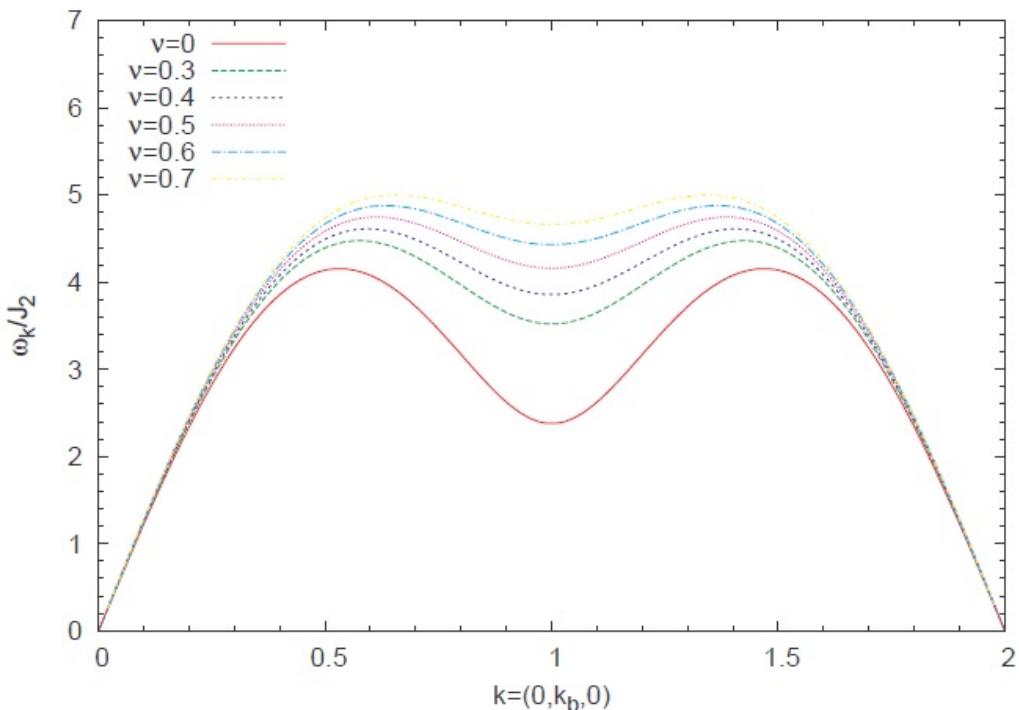


(б) Однос брзина v_b/v_a

Слика 4.5: Однос брзина спинских таласа у зависности од параметра x за $S = 1$ и $\mu = 0.25$.



(а) Ортогонално на спинске траке и између слојева



(б) Паралелно са спинским тракама

Слика 4.6: Дисперзија у јединицама J_2 за $x = 1$, $S = 1$ и $\mu = 0.25$.

Глава 5

Пникиди гвожђа

У овом поглављу се даје преглед и поређење експерименталних резултата и теоријских модела који описују пникиде гвожђа. Дискутуваћемо различите експерименталне резултате за пникиде типа 122 и фитовати наш модел са биквадратном изменом и без ње на брзине спинских таласа мерене помоћу нееластичног расејања неутрона.

5.1 Резултати за тродимензионалну колинеарну фазу без биквадратне измене

Прво ћемо размотрити модел без биквадратне изменске интеракције. У првим експериментима расејања неутрона за једињења SrFe_2As_2 [19] и BaFe_2As_2 [3] није било могуће измерити брзину спинског таласа v_b . За брзине ортогоналне на спинске траке и између слојева добијене су вредности

$$v_a \approx 205 \text{ meV},$$

$$v_c \approx 45 \text{ meV}.$$

У недостатку експерименталних резултата, Онг и др. [12] предложили су вредност за v_b

$$v_b \approx (10 - 30) \text{ meV}.$$

За односе брзина спинских таласа добијено је

$$\frac{v_b}{v_a} = 0.049 - 0.0146,$$

$$\frac{v_c}{v_a} = 0.220.$$

У нашој анализи ограничићемо се на вредност $v_b = 20 \text{ meV}$, тј. $v_b/v_a = 0.098$. Са овим вредностима нумеричким прорачунима добијени су резултати

$$x = 1.974,$$

$$\mu = 0.114.$$

Пникиди гвожђа се налазе у близини квантног фазног прелаза за вредности брзине спинског таласа v_b одређене од стране Онга. Вредност одређена за x је у сагласности са резултатима за дводимензионалну колинеарну фазу [16]. Жао [18] и Диало [1] су

	v_a	v_b	v_c	v_b/v_a	v_c/v_a
Жао	181	127	44	0.704	0.246
Диало	187	135	42	0.722	0.222
Онг	205	10-30	45	0.049-0.146	0.220

Табела 5.1: Брзине спинских таласа

извели експерименте расејања неутрона на пникиду гвожђа CaFe_2As_2 . У табели 5.1 дати су експериментални резултати добијени у тим експериментима. Приказане су бројне вредности брзина спинских таласа у meV. Резултати добијени у оба експеримента се добро слажу. У поређењу са брзином спинског таласа v_b коју је предложио Онг измерене су много веће вредности. Параметри x и μ одређени су нумерички. Резултати су приказани у табели 5.2. Оба резултата указују да се пникиди налазе у колинеарној фази. Ово је у сагласности са досадашњим разматрањима да се за висок однос v_b/v_a систем не може налазити у близини квантног фазног прелаза. Да бисмо одредили које вредности брзина спинских таласа да надаље користимо, размотрићемо дисперзију спинских таласа. Потребно је да одредимо вредност изменске константе J_2 . За вредности брзине v_b можемо израчунати вредности параметара

	x	μ
Жао	0.760	0.245
Диало	0.716	0.211
Онг	1.974	0.114

Табела 5.2: Добијени параметри модела за тродимензионалну колинеарну фазу

	J_1	J_c	J_2	\tilde{J}_{1a}	\tilde{J}_{1b}	\tilde{J}_c	\tilde{J}_2
Онг	50.8	5.8	25.7	59.0	40.2	4.8	20.6
Жао	23.2	5.7	30.5	22.4	21.4	4.5	34.6
Диало	23.1	4.9	32.3	22.4	21.4	4.5	34.6

Табела 5.3: Вредности изменских и ефективних изменских константи у meV

$x = J_1/J_2$ и $\mu = J_c/J_1$. Израчунаћемо и ефективне изменске константе

$$\tilde{J}_{1a} = J_1(S - \alpha_1), \quad (5.1a)$$

$$\tilde{J}_{1b} = J_1(S - \beta), \quad (5.1b)$$

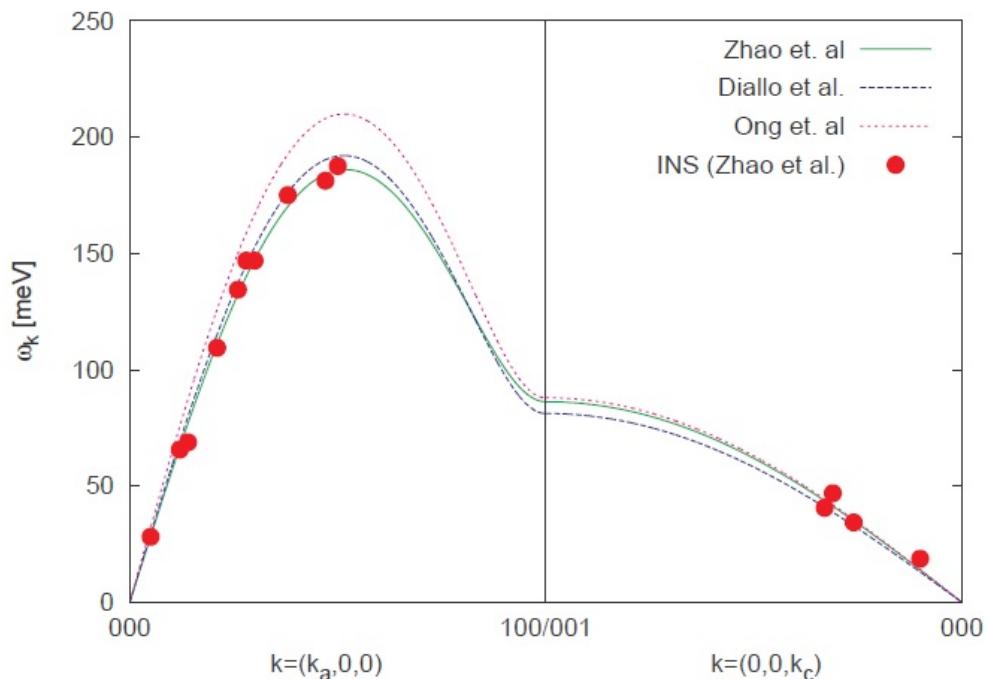
$$\tilde{J}_c = J_c(S - \alpha_c), \quad (5.1c)$$

$$\tilde{J}_2 = J_2(S - \alpha_2). \quad (5.1d)$$

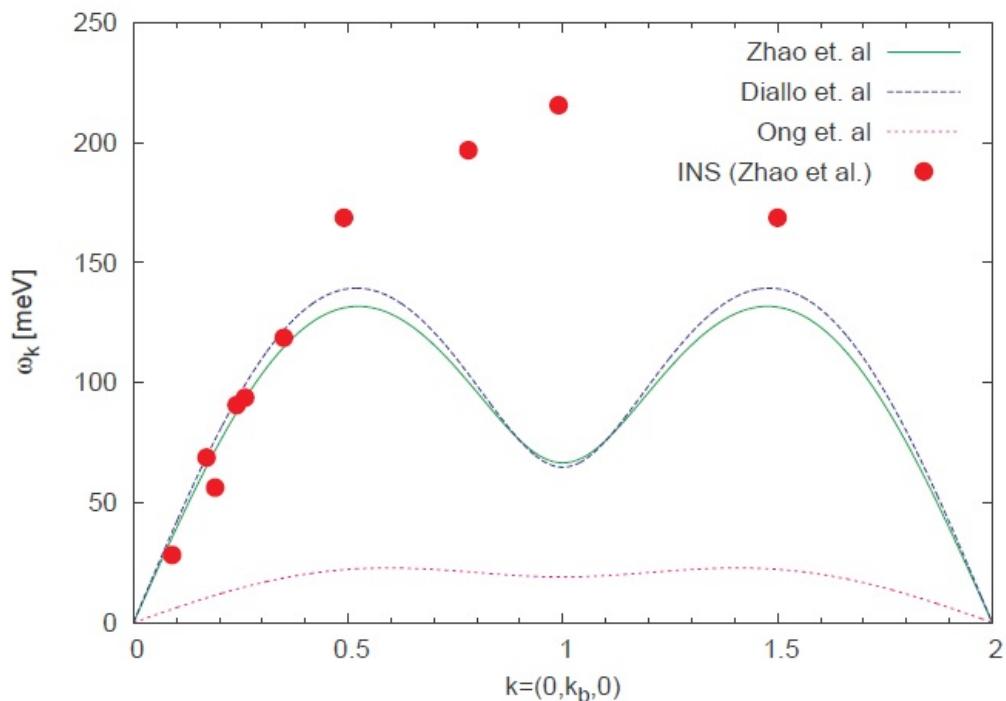
Резултати су дати у табели 5.3. Дисперзија тродимензионалне колинеарне фазе је дата на слици 5.1.

Дуж правца k_a и k_c видимо добро слагање резултата, док у правцу k_b видимо велика одступања. Та одступања су очекивана имајућу у виду да је брзина спинског таласа v_b коју је предложио Онг много мања од оне коју су измерили Жао и Диало. Експерименти са расејањем неутрона се изводе на високим енергијама, па је могуће да су неке моде ниске енергије занемарене.

Параметре које су експериментално одредили Жао и Диало дисперзиона релација коју смо добили добро репродукује за мале вредности импулса, али за високе енергије долази до велике разлике. Наша дисперзија има минимум у тачки $k = (0, 1, 0)$, док експерименти у тој тачки показују максимум. То је могуће у случају да ефективна изменска интеракција паралелна са спинским тракама постане негативна, заправо да имамо феромагнетну измену.



(a) Ортогонално на спинске траке и између слојева



(b) Паралелно са спинским тракама

Слика 5.1: Дисперзија спинских таласа за модел тродимензионалне колинеарне фазе без биквадратне измене. Црвене тачке су добијене у експериментима Жаоа [15].

5.2 Резултати за тродимензионалну колинеарну фазу са биквадратном изменом

Размотрићемо резултате за брзине спинских таласа у CaFe_2As_2 измерене у експериментима Жаоа и Диалоа. Вредности за параметар ν одабране су у опсегу од 0.3-0.6 на основу прорачуна [17]. Утицај биквадратне изменске интеракције појачава утицај анизотропије паралелно и ортогонално на спинске траке. Експериментални подаци добијени у оба експеримента су врло слични, а такође постоји слагање између резултата добијених расејањем неутрона и нашег модела.

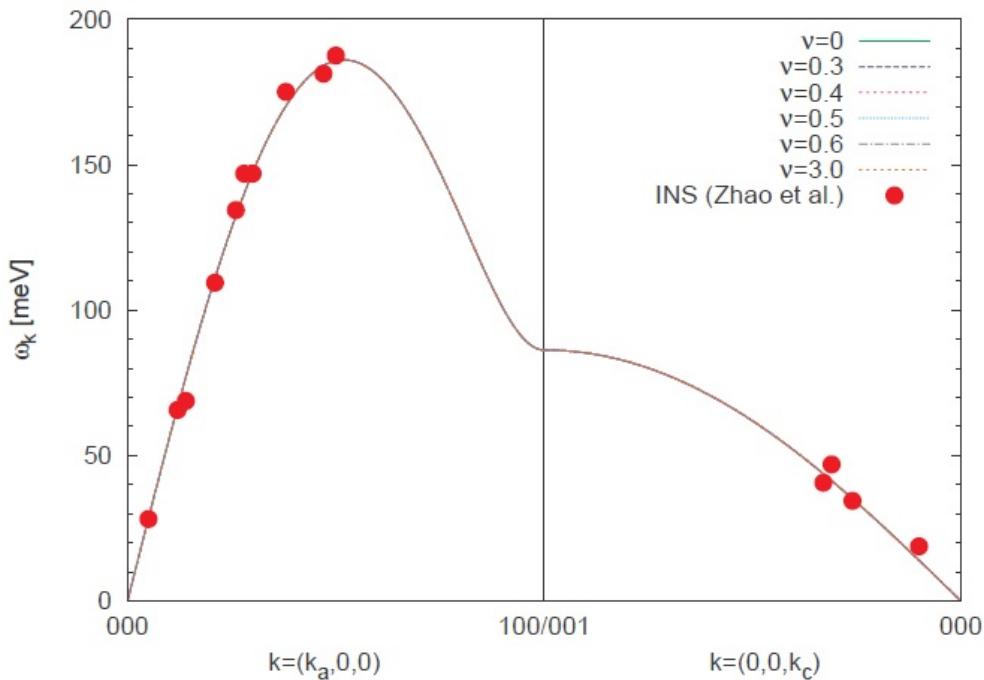
Дисперзија у правцу k_b није много побољшана што је представљено на графицима (слике 5.2 и 5.3). Подударање са експерименталним подацима је и даље добро за мале вредности импулса док за импулсе у близини $k = (0, 1, 0)$ постоје знатна одступања.

Израчунате су и вредности параметара за прилично велику, али практично мало вероватну биквадратну изменску интеракцију са вредношћу $\nu = 3.0$. На графицима се примећује да је промена ове интеракције утицала само на дисперзију дуж правца b . Минимум који је постојао за мале вредности параметра ν је практично нестао, а добијен је плато за вредности $k = (0, 1, 0)$ али и даље постоји одступање од експерименталних вредности.

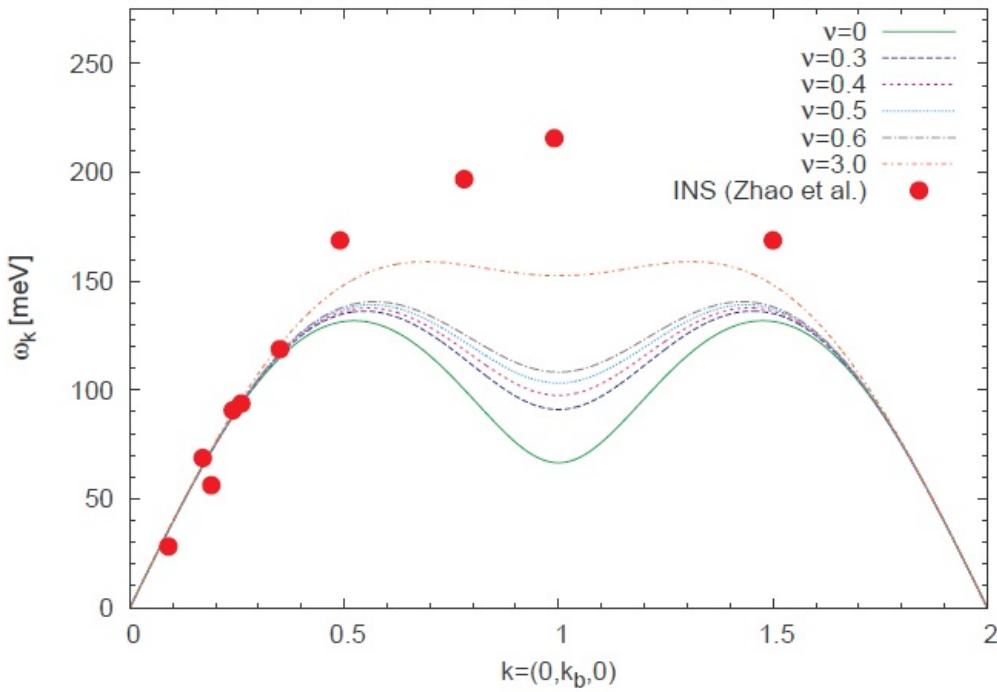
Објашњење за овакво понашање модела можемо објаснити на следећи начин. Однос $x = J_1/J_2$ опада са повећањем ν . Са повећањем биквадратне измене расте и брзина спинског таласа v_a . Да би однос v_b/v_a остао константан, x се мора повећати. Такође, купловање између слојева $\mu = J_c/J_1$ се мора повећати да би однос брзина v_c/v_a остао исти. Израчуната вредност за x указује да се систем налази на платоу посртајуће магнетизације. Стога, други ефекти су одговорни за мале статичке локалне моменте мерење у експерименту.

У моделу са биквадратном интеракцијом видели смо да је дошло до побољшања поклапања експерименталних резултата за дисперзију паралелну са спинским тракама. Примећено је и јачање анизотропије ефективних изменских константи између најближих суседа у оквиру исте равни. За мале вредности момената и енергија доби-

јене су вредности које се добро слажу са експериментом. Међутим, није било могуће репродуковати доволно добре резултате за велике вредности енергија и момената.

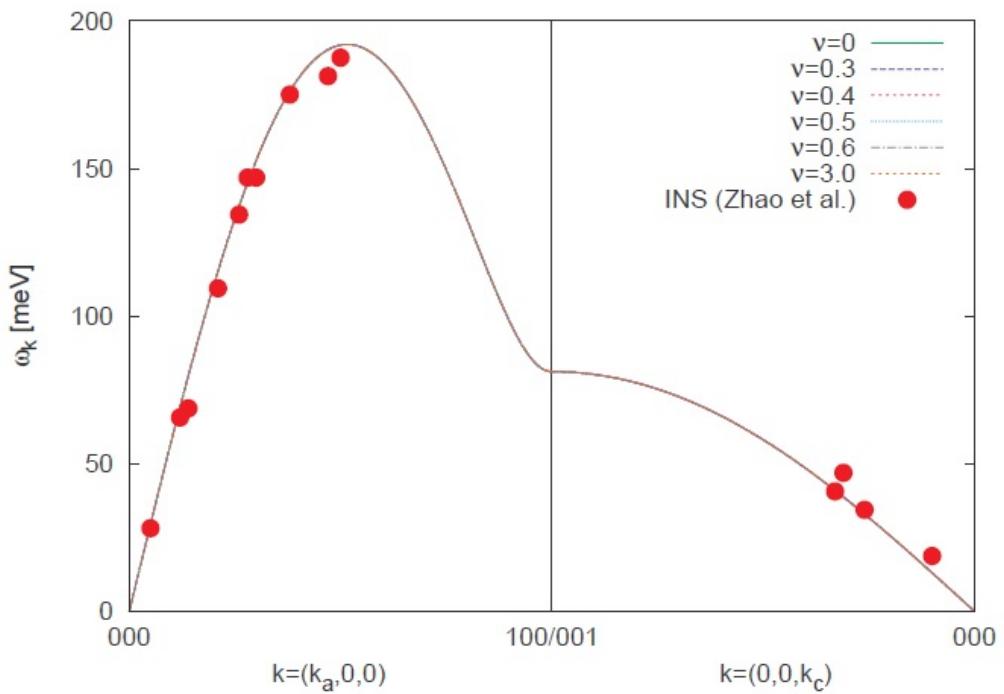


(a) Ортогонално на спинске траке и између слојева

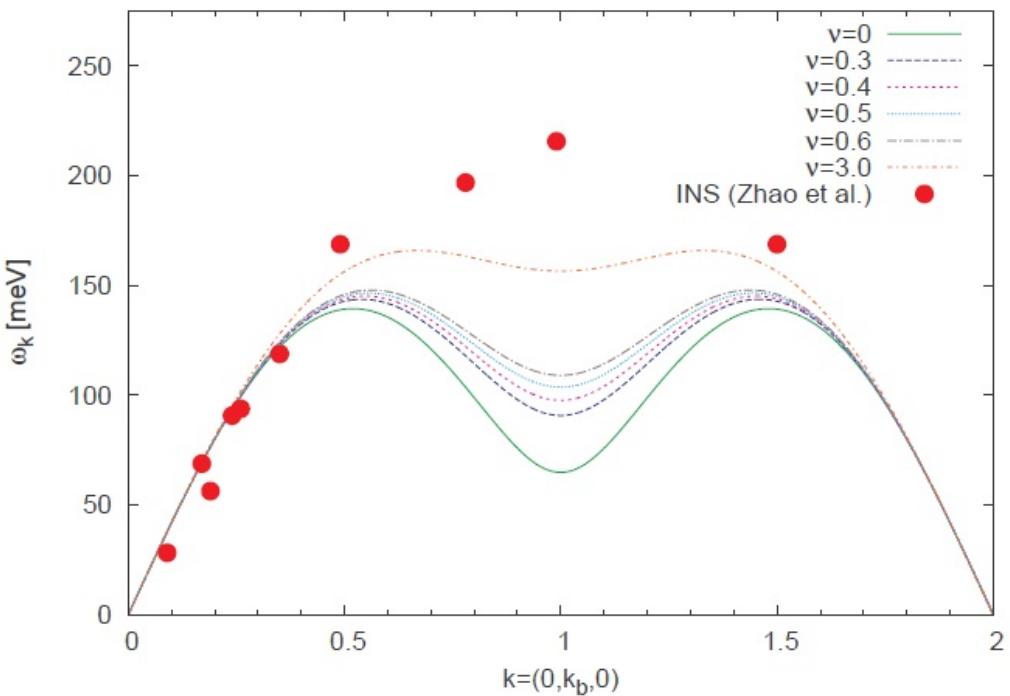


(б) Паралелно са спинским тракама

Слика 5.2: Дисперзија спинских таласа за модел тродимензионалне колинеарне фазе са биквадратном изменом за различите вредности параметра ν . Црвене тачке су добијене у експериментима Жаоа [15].



(а) Ортогонално на спинске траке и између слојева



(б) Паралелно са спинским тракама

Слика 5.3: Дисперзија спинских таласа за модел тродимензионалне колинеарне фазе са биквадратном изменом за различите вредности параметра ν . Црвене тачке су добијене у експериментима Диалоа [15].

Глава 6

Закључак

У овом раду циљ нам је био да фрустрирани Хајзенбергов модел у колинеарној фази у три димензије применимо на пниктиде гвожђа. Пошли смо од Хајзенберговог модела за дводимензионалну Нелову фазу са биквадратном изменом. Применили смо декупловање билинеарних и биквадратних чланова у апроксимацији средњег поља у репрезентацији Дајсон-Маљејева. Резултате смо упоредили са резултатима добијеним егзактном дијагонализацијом и развојем у ред где смо уочили добро поклањање. Модел смо проучавали у оквиру самосагласне теорије спинских таласа.

Надаље смо разматрали Хајзенбергов $J_1 - J_2 - J_c$ модел без биквадратне измене и са њом у тродимензионалној фази где је интеракција између слојева (у правцу c) антиферомагнетна. Циљ нам је био да дођемо до дисперзионих релација и енергије основног стања. Хамилтонијан средњег поља смо дијагонализовали помоћу трансформације Богольбова. Систем самосагласних једначина за уведене параметре решаван је нумерички применом методе Бројдена.

Разлог за проучавање тродимензионалног модела су експерименти расејања неутрона у којима је препозната тродимензионална природа пниктида гвожђа. Колинеарна фаза је стабилизована изменском интеракцијом између слојева. Међутим, у близини критичне тачке тродимензионална колинеарна фаза је дестабилизована због два могућа сценарија. По првом сценарију који смо назвали сценарио вођен магнетизацијом, магнетизација нестаје, док брзине спинских таласа остају коначне. По другом сценарију (сценарио вођен брзином) магнетизација задржава коначне вред-

ности, а брзина спинских таласа v_b опада на нулу. Прелаз између ова два сценарија зависи од вредности спина S и параметра $\mu = J_c/J_1$. За мале вредности спина и параметра μ одвија се први сценарио, док се за веће вредности одвија други сценарио.

Приметили смо да увођењем биквадратне измене имамо појачање изменске интеракције и паралелно и ортогонално на спинске траке. Утицаји биквадратне измене у та два смера нису једнаки, па се јавља анизотропија између константи \tilde{J}_1 и \tilde{J}_2 . Тиме је практично уведена аанизотропија у моделу. Дуж правца k_b јавља се минимум у тачки $k = (0, 1, 0)$ који се не може елиминисати јер је утицај биквадратне измене сувише мали.

Експериментално измерене вредности брзина спинских таласа у пниктидима гвожђа искоришћене су за фитовање нашег модела и одређивање параметара. Наш модел тродимензионалне колинеарне фазе може врло добро описати експерименталне резултате за пниктид CaFe_2As_2 у правцу ортогоналном на спинске траке и у правцу између слојева, док у правцу паралелном са спинским тракама поклапања нису тако добра. У правцу паралелном са спинским тракама репродуковани су добри резултати за мање вредности енергије. За веће вредности енергије примећена су значајна одступања. Наш модел достиже минимум у $k = (0, 1, 0)$ док експерименти Жаоа у тој тачки дају максимум. За такав опис, модел мора поседовати феромагнетну измену паралелну са спинским тракама, што није могуће увести биквадратном изменом. За боље разумевање процеса потребно је више експерименталних резултата на високим енергијама.

Уочено је неслагање у истраживањима различитих група научника. За пниктиде SrFe_2As_2 и BaFe_2As_2 Онг је предложио вредност брзине спинског таласа у интервалу $v_b = (10 - 30) \text{ meV}$. За те вредности v_b добија се да се систем налази у близини квантног фазног прелаза, што је повезано са снажном ренормализацијом локалног магнетног момента услед квантних флуктуација. Са друге стране у радовима Жаоа и Диалоа измерене брзине спинског таласа v_b за пниктид CaFe_2As_2 су много веће од оне коју је предложио Онг. На основу тих резултата закључујемо да се пниктиди

налазе у колинеарној фази. Жао и Диало су вршили експерименте са расејањем неутрона за високе енергије. Потребно је извести експерименте и за мање вредности енергије да бисмо могли боље да сагледамо особине пниктида.

У овом раду коришћен је локализован модел. Поједини експериментални резултати сугеришу да би можда требало применити нелокализован модел или комбинацију локализованог и нелокализованог модела.

Додатак А

А.1 Дводимензионални интеграл

Дводимензионална колинеарна фаза се добија када је $x = 0$. Интеграција се врши по k_a и k_b . Самосагласне једначине тада гласе

$$\begin{aligned}\alpha_1 = \alpha_c = \beta &= \frac{2}{\pi^2} \int_0^{1/2} dk_a \int_0^{1/2} dk_b \frac{1}{\sqrt{1 - (\cos k_a \cdot \cos k_b)^2}} - \frac{1}{2}, \\ &= \frac{2}{\pi^2} \int_0^{1/2} dk_a \int_0^{1/2} dk_b f(k_a, k_b) - \frac{1}{2} \quad (\text{A.1a})\end{aligned}$$

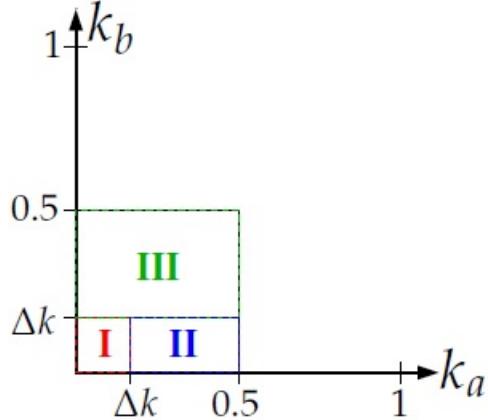
$$\alpha_2 = \frac{2}{\pi^2} \int_0^{1/2} dk_a \int_0^{1/2} dk_b \sqrt{1 - (\cos k_a \cdot \cos k_b)^2} - \frac{1}{2}, \quad (\text{A.1b})$$

где смо искористили симетрију функције $\cos x$ око нуле. Подинтегрална величина за α_2 не дивергира. Подинтегрална величина за остале параметре као и за посртајућу магнетизацију дивергира у тачки $(0,0)$

$$\begin{aligned}m_{st} &= S + \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi^2} \int_0^{1/2} dk_a \int_0^{1/2} dk_b \frac{1}{\sqrt{1 - (\cos k_a \cdot \cos k_b)^2}} \\ &= S + \frac{1}{2} - \frac{2}{\pi^2} \int_0^{1/2} dk_a \int_0^{1/2} dk_b f(k_a, k_b). \quad (\text{A.2})\end{aligned}$$

Да бисмо елиминисали дивергенцију, развијамо подинтегрални израз за мале вредности k

$$f(k_a, k_b) \rightarrow \tilde{f}(k_a, k_b) \approx \frac{1}{\sqrt{k_a^2 + k_b^2}}. \quad (\text{A.3})$$



Слика А.1: Растављање домена интеграције у две димензије

Ову величину сада можемо интегралити аналитички у правоугаонику дужина \tilde{k}_a и \tilde{k}_b

$$\tilde{F}(\tilde{k}_a, \tilde{k}_b) = \int_0^{\tilde{k}_a} d\tilde{k}_a \int_0^{\tilde{k}_b} d\tilde{k}_b \tilde{f}(k_a, k_b) = \tilde{k}_a \text{arsinh} \frac{\tilde{k}_b}{\tilde{k}_a} + \tilde{k}_b \text{arsinh} \frac{\tilde{k}_a}{\tilde{k}_b}. \quad (\text{A.4})$$

За вредност \tilde{k}_a и \tilde{k}_b узимамо $\tilde{k}_a = \tilde{k}_b = \Delta k = 10^{-3}$, што даје $F(\tilde{k}_a, \tilde{k}_b) \approx 0.0017627$.

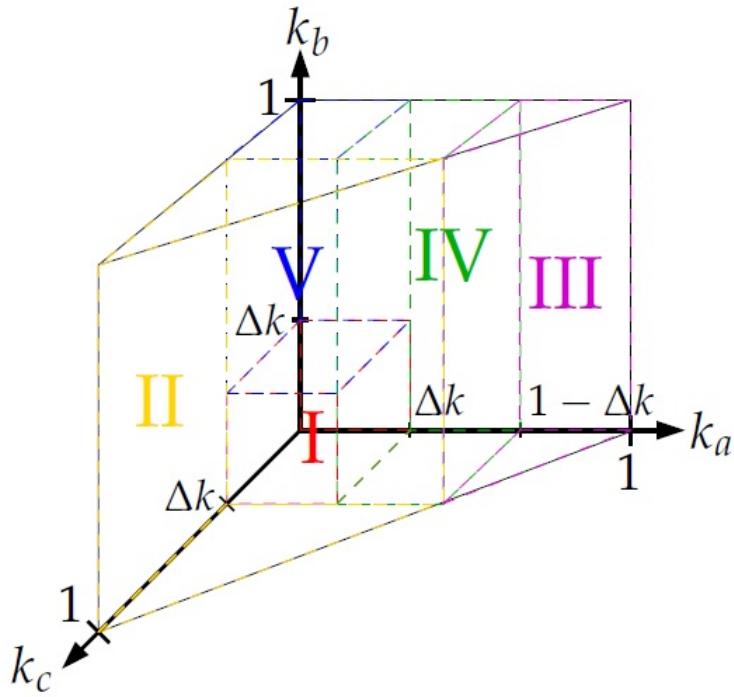
Интеграл за посртавајућу магнетизацију и параметре (осим α_2) можемо раздвојити на три дела чије су области интеграције приказане на слици А.1.

$$\begin{aligned} I &= \int_0^{1/2} dk_a \int_0^{1/2} dk_b \frac{1}{f}(k_a, k_b) \\ &= \underbrace{F(\Delta k, \Delta k)}_{\text{I}} + \underbrace{\int_{\Delta k}^{1/2} dk_a \int_0^{\Delta k} dk_b f(k_a, k_b)}_{\text{II}} + \underbrace{\int_0^{1/2} dk_a \int_{\Delta k}^{1/2} dk_b f(k_a, k_b)}_{\text{III}}. \end{aligned} \quad (\text{A.5})$$

A.2 Тродимензионални интеграл

Дивергенција се у случају интеграла у три димензије јавља само у случају посртавајуће магнетизације

$$\begin{aligned} m_{st} &= S + \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi^3} \int_0^1 dk_a \int_0^1 dk_b \int_0^{1-k_a} dk_c \frac{\bar{A}_k}{\sqrt{\bar{A}_k^2 - \bar{B}_k^2}} \\ &= S + \frac{1}{2} - \frac{1}{\pi^3} \int_0^1 dk_a \int_0^1 dk_b \int_0^{1-k_a} dk_c g(k_a, k_b, k_c). \end{aligned} \quad (\text{A.6})$$



Слика А.2: Растављање домена интеграције за интеграл у посртајућој магнетизацији

Као и у случају интеграла у две димензије циљ нам је да раставимо домен интеграције и да подинтегралну величину развијемо у ред за мале вредности k . Област интеграције растављамо на пет делова као што је приказано на слици 7.2. Интеграл који се јавља можемо записати на следећи начин

$$\begin{aligned}
 \int_0^1 dk_a \int_0^1 dk_b \int_0^{1-k_a} dk_c g(k_a, k_b, k_c) &= \underbrace{\int_0^{\Delta k} dk_a \int_0^{\Delta k} dk_b \int_0^{\Delta k} dk_c \tilde{g}(k_a, k_b, k_c)}_{\text{I}} \\
 &+ \underbrace{\int_0^{1-\Delta k} dk_a \int_0^1 dk_b \int_{\Delta k}^{1-k_a} dk_c g(k_a, k_b, k_c)}_{\text{II}} \\
 &+ \underbrace{\int_{1-\Delta k}^1 dk_a \int_0^1 dk_b \int_0^{1-k_a} dk_c g(k_a, k_b, k_c)}_{\text{III}} \quad (\text{A.7}) \\
 &+ \underbrace{\int_{\Delta k}^{1-\Delta k} dk_a \int_0^1 dk_b \int_0^{\Delta k} dk_c g(k_a, k_b, k_c)}_{\text{IV}} \\
 &+ \underbrace{\int_0^{\Delta k} dk_a \int_{\Delta k}^1 dk_b \int_0^{\Delta k} dk_c g(k_a, k_b, k_c),}_{\text{V}}
 \end{aligned}$$

где је развој у ред за мале вредности импулса.

$$\tilde{g}(k_a, k_b, k_c) \approx \frac{2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)}{\sqrt{v_a^2 k_a^2 + v_b^2 k_b^2 + v_c^2 k_c^2}}. \quad (\text{A.8})$$

Да бисмо избегли дивергенцију интеграла у тачки $(0,0,0)$ заменићемо векторе решетке њиховим квадратима

$$I \rightarrow \int_0^{\sqrt{\Delta k}} dk_a \int_0^{\sqrt{\Delta k}} dk_b \int_0^{\sqrt{\Delta k}} dk_c \frac{2J_2(S - \alpha_2) + J_1(S - \alpha_1) + J_c(S - \alpha_c)}{\sqrt{v_a^2 k_a^4 + v_b^2 k_b^4 + v_c^2 k_c^4}} 6k_a k_b k_c. \quad (\text{A.9})$$

Подинтегрална величина је сада глатка у $k = (0, 0, 0)$ и интеграл се може израчунати нумерички.

Литература

- [1] S. O. Diallo, V. P. Antropov, T. G. Perring, C. Broholm, J. J. Pulikkotil, N. Ni, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, A. Kreyssig, A. I. Goldman, and R. J. McQueeney, *Itinerant Magnetic Excitations in Antiferromagnetic CaFe₂As₂*, Phys. Rev. Lett. **102**, 187206 (2009)
- [2] F. J. Dyson, *General Theory of Spin-Wave Interactions*, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956)
- [3] R. A. Ewings, T. G. Perring, R. I. Bewley, T. Guidi, M. J. Pitcher, D. R. Parker, S. J. Clarke, A. T. Boothroyd, *High energy spin excitations in BaFe₂As₂*, Phys. Rev. B **78**, 220501(R) (2008)
- [4] M. Holt, *Modelling Magnetic Dynamics in High-Temperature Superconductors*, PhD Thesis, UNSW Sydney, (2012)
- [5] J. Hubbard, *Electron Correlations in Narrow Energy Bands*, Proc. Roy. Soc. A **276**, 238 (1963)
- [6] J. Bardeen, L. N. Cooper, and J. R. Schrieffer, *Theory of Superconductivity*, Phys. Rev. **108**, 1175 (1957)
- [7] Y. Kamihara, T. Watanabe, M. Hirano, H. Hosono, *Iron-Based Layered Superconductor LaO_{1-x}F_xFeAs (x = 0.05 – 0.12) with T_c = 26K*, **130**, 11 (2008)
- [8] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, and H. Hosono, *Iron-Based Layered Superconductor: LaOFeP*, J. Am. Chem. Soc. **128**, 31 (2006)

-
- [9] S. V. Maleev, *Scattering of Slow Neutrons in Ferromagnets*, Sov. Phys. JETP, **6**, 4 (1958)
- [10] R. J. McQueeney, S. O. Diallo, V. P. Antropov, G. D. Samolyuk, C. Broholm, N. Ni, S. Nandi, M. Yethiraj, J. L. Zarestky, J. J. Pulikkotil, et al. *Anisotropic Three-Dimensional Magnetism in CaFe₂As₂*, Phys. Rev. Lett. **101**, 22 (2008)
- [11] J. Oitmaa, C. Hamer, W. Zheng, *Series Expansion Methods for Strongly Interacting Lattice Models*, Cambridge University Press, (2006)
- [12] A. Ong, G. S. Uhrig, and O. P. Sushkov, *Spin-Wave Velocities, Density of Magnetic Excitations, and NMR Relaxation in Iron Pnictides*, Phys. Rev. B **80**, 014514 (2009)
- [13] Z. A. Ren, G. C. Che, X. L. Dong, J. Yang, W. Lu, W. Yi, X. L. Shen, Z. C. Li, L. L. Sun, F. Zhou, Z. X. Zhao, *Superconductivity and Phase Diagram in the Iron-based Arsenic-oxides ReFeAsO_{1-δ} (Re = rare earth metal) without F-Doping*, EPL, **83**, 1 (2008)
- [14] R. R. P. Singh, W. Zheng, J. Oitmaa, O. P. Sushkov, and C. J. Hamer, *Symmetry Breaking in the Collinear Phase of the J₁ J₂ Heisenberg Model*, Phys. Rev. Lett. **91**, 017201 (2003)
- [15] D. Stanek, O. P. Sushkov, G. S. Uhrig, *Self-Consistent Spin-Wave Theory for a Frustrated Heisenberg Model with Biquadratic Exchange in the Columnar Phase and its Application to Iron Pnictides*, Phys. Rev. B **84**, 064505 (2011)
- [16] G. S. Uhrig, M. Holt, J. Oitmaa, O. P. Sushkov, R. R. P. Singh, *Pnictides as Frustrated Quantum Antiferromagnets Close to a Quantum Phase Transition*, Phys. Rev. B **79**, 092416 (2009)
- [17] A. N. Yaresko, G. Q. Liu, V. N. Antonov, O. K. Andersen, *Interplay Between Magnetic Properties and Fermi Surface Nesting in Iron Pnictides*, Phys. Rev. B, **79**(14), 144421. (2009)

-
- [18] J. Zhao, D. T. Adroja, D. X. Yao, R. Bewley, S. Li, X. F. Wang, G. Wu, X. H. Chen, J. Hu, P. Dai, *Spin Waves and Magnetic Exchange Interactions in CaFe₂As₂*, Nature Physics **5**, 8 (2009)
 - [19] J. Zhao, D. X. Yao, S. Li, T. Hong, Y. Chen, S. Chang, W. Ratcliff II, J. W. Lynn, H. A. Mook, G. F. Chen, et al. *Low Energy Spin Waves and Magnetic Interactions in SrFe₂As₂*, Phys. Rev. Lett. **101**, 16 (2008)

Биографија

Константин Видаковић рођен је 5.9.1991. у Вршцу.

Основну школу *Олга Петров Радишић* и природно-математички смер Гимназије *Борислав Петров Браца* завршио је у Вршцу. Основне академске студије уписује 2010. године на Физичком факултету Универзитета у Београду, смер Теоријска и експериментална физика. Након завршетка основних студија уписује мастер академске студије на Природноматематичком факултету Универзитета у Новом Саду, модул истраживачки - Теоријска физика кондензоване материје. Запослен је као наставник физике у основној школи у Вршцу.



Универзитет у Новом Саду
Природно-математички факултет
Кључна документацијска информација:

Редни број:

РБР

Идентификациони број:

ИБР

Тип документације:

Монографска документација

ТД

Тип записа:

Текстуални штампани материјал

ТЗ

Врста рада:

Мастер рад

ВР

Аутор:

Константин Видаковић

АУ

Ментор:

др Милан Пантић

МН

Наслов рада:

Примена фрустрираног Хајзенберговог модела на пниктиде гвожђа

Језик публикације:

српски (Ћирилица)

ЈП

Језик извода:

српски (Ћирилица) / енглески

ЈИ

Земља публиковања:

Србија

ЗП

Уже географско подручје:

Војводина

УГП

Година:

2022

ГО

Издавач:

Ауторски репринт

ИЗ

Место и адреса: МА	Природно-математички факултет, Трг Доситеја Обрадовића 4, Нови Сад
Физички опис рада: ФО	(поглавља/страна/цитата/табела/графика/додатака) (6/69/19/3/24/1)
Научна област: НО	Физика
Научна дисциплина: НД	Теоријска физика кондензоване матерije
Кључне речи: КР	Хајзенбергов модел, колинеарна фаза, пниктиди гвожђа, високотемпературни суперпроводници
Чува се: ЧУ	Библиотека департмана за физику ПМФ-а у Новом Саду
Важна напомена: ВН	нема
Извод: ИЗ	У овом раду се анализира фрустрирани Хајзенбергов модел у три димензије и његова примена на пниктиде гвожђа.
Датум прихватања теме од НН већа: ДП	
Датум одбране: ДО	
Чланови комисије: КО	
Председник комисије:	др Миодраг Крмар, редовни професор Природно-математички факултет, Нови Сад
Члан:	др Слободан Радошевић, редовни професор Природно-математички факултет, Нови Сад
Члан:	др Милан Пантић, редовни професор Природно-математички факултет, Нови Сад

University of Novi Sad
Faculty of Science

Key Words Documentation:

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Documentation type:

Monograph documentation

DT

Type of record:

Textual printed material

TR

Content code:

Final paper

CC

Author:

Konstantin Vidaković

AU

Mentor:

dr Milan Pantić

MN

Title:

The application of a frustrated Heisenberg model for the iron pnictides

Language of text:

Serbian (cyrillic)

LT

Language of abstract:

English

LA

Country of publication:

Serbia

CP

Locality of publication:

Vojvodina

LP

Publication year:

2022

PY

Publisher:

Author's preprint

PU

Publication place:
PP Faculty of Science,
Dositej Obradović Square 4, Novi Sad

Physical description:
PD (6/69/19/3/24/1)

Scientific field:
SF Physics

Scientific discipline:
SD Theoretical Condensed Matter Physics

Key words:
KW Heisenberg model, collinear phase, iron pnictides,
high-temperature superconductors

Holding data:
HD Library of Department of Physics,
Faculty of Science, Novi Sad

Note:
N none

Abstract:
AB This paper analyses frustrated Heisenberg model in three dimensions and its application for iron pnictides.

Accepted by the Scientific Board:
ASB

Defended on:
DE

Thesis defend board:
DB

President:
dr Miodrag Krmar, Full professor
Faculty of Science, Novi Sad

Member:
dr Slobodan Radošević, Associate Professor
Faculty of Science, Novi Sad

Member:
dr Milan Pantić, Full professor
Faculty of Science, Novi Sad