



UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO-MATEMATIČKI  
FAKULTET  
DEPARTMAN ZA FIZIKU



# Primena Hajzenbergovog modela u analizi magnetnih karakteristika halkogenida europijuma EuO

-diplomski rad-

Mentor: dr Slobodan Radošević

Kandidat: Andjela Šakota

Novi Sad, 2018.

# Sadržaj

<b>Uvod</b>	<b>3</b>
<b>1 Bozonske reprezentacije spinskih operatora</b>	<b>4</b>
1.1 Blohova aproksimacija . . . . .	6
1.2 Holštajn-Primakovljeva reprezentacija . . . . .	6
1.3 Dajson-Maljejevljeva reprezentacija . . . . .	7
<b>2 Hajzenbergov hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji</b>	<b>8</b>
2.1 Disperzija u aproksimaciji prvih i drugih suseda . . . . .	9
2.2 Izraz za relativnu magnetizaciju u Blohovoj aproksimaciji . . . . .	11
<b>3 Određivanje integrala izmene iz disperzije na primeru EuO</b>	<b>13</b>
3.1 Osobine izotropnog feromagneta EuO . . . . .	13
3.2 Disperzija duž različitih pravaca u recipročnoj rešetki . . . . .	14
3.3 Fitovanje disperzije polazeći od hamiltonijana koji sadrži interakciju prvih i drugih suseda . . . . .	17
<b>4 Relativna magnetizacija u Blohovoj aproksimaciji u funkciji temperature</b>	<b>22</b>
<b>Zaključak</b>	<b>24</b>
<b>A Dobijanje izraza za disperziju u Blohovoj aproksimaciji za interakciju među najbližim susedima</b>	<b>25</b>
<b>B Površinski centrirana kubna rešetka</b>	<b>27</b>

# Uvod

Za razliku od niskotemperaturskih superprovodnika, za koje važi BCS teorija (*Bardeen, Cooper, Schrieffer*), za visokotemperaturske superprovodnike još uvek ne postoji zadovoljavajuća teorija koja bi ih opisala. Veruje se da je mehanizam visokotemperaturske superprovodnosti kod jedinjenja poput  $\text{La}_2\text{CuO}_4$  u vezi sa njihovim magnetnim karakteristikama. Krajem prošlog veka, ova ideja je postavila ispitivanje magnetnih materijala u žižu eksperimentalnih i teorijskih istraživanja. U ovom radu biće ispitivan halkogenid europijuma  $\text{EuO}$ , koji je magnetni dielektrik (izolator), i za njegov opis se može koristiti Hajzenbergov model.

U prvoj glavi dat je osvrt na bozonske reprezentacije spinskih operatora, dok su u drugoj glavi prikazani Hajzenbergov hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji i analitički izraz za disperziju u aproksimaciji prvi, i prvi i drugih suseda. Dobijen je izraz za relativnu magnetizaciju i pokazano je kako se u Blohovoj aproksimaciji ponaša relativna magnetizacija na niskim temperaturama, tzv. Blohov zakon  $T^{\frac{3}{2}}$ . U trećoj glavi su date neke od osobina izotropnog feromagnetika  $\text{EuO}$ . Iz eksperimentalnih rezultata za disperziju duž različitih pravaca u recipročnoj rešetki, pokazano je da Hajzenbergov hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji sa interakcijom između najbližih suseda ne može biti korišćen za opisivanje magnetnih karakteristika  $\text{EuO}$ . Međutim, korišćenjem Hajzenbergovog hamiltonijana sa interakcijom između najbližih i sledećih najbližih suseda, u Blohovoj aproksimaciji, teorijska disperzija je uspešno reprodukovala eksperimentalne rezultate duž različitih pravaca recipročne rešetke. Upotreborom vrednosti integrala izmene dobijenih u Glavi 3, u Glavi 4 su date zavisnost relativne magnetizacije od temperature i Kirijeva temperatura. Rezultati su poređeni sa eksperimentom. Na kraju rada je ukazano na moguće pravce daljeg istraživanja.

U Prilogu A prikazani su matematički detalji dobijanja izraza za disperziju u Blohovoj aproksimaciji, za interakciju među najbližim susedima, dok su u Prilogu B određeni prvi i drugi susedi u površinski centriranoj magnetnoj rešetki i odgovarajući geometrijski faktori.

Radi jednostavnosti pisanja, vektori u tekstu su boldovani, dok su iznad operatora stavljene kapice.

# Glava 1

## Bozonske reprezentacije spinskih operatora

U kvantnoj teoriji magnetizma, postoji niz spinskih hamiltonijana koji se mogu koristiti za opisivanje različitih magnetnih materijala [1, 2]. Akcenat će biti stavljen na magnetne dielektrike, kod kojih su operatori spina pridruženi čvorovima rešetke. Spinovi obrazuju magnetnu rešetku. Operatori spina  $\hat{\mathbf{S}}_n = (\hat{S}_n^x, \hat{S}_n^y, \hat{S}_n^z)$  i  $\hat{\mathbf{S}}_m = (\hat{S}_m^x, \hat{S}_m^y, \hat{S}_m^z)$  koji su pridruženi čvorovima  $n, m$ , respektivno, međusobno interaguju kvantnomehaničkom interakcijom izmene, koja je u spinske hamiltonijane uključena preko integrala izmene  $I_{n,m}$ . Ovi operatori zadovoljavaju sledeće relacije:

$$\hat{S}_n^\pm = \hat{S}_n^x \pm i\hat{S}_n^y; \quad (1.1)$$

$$[\hat{S}_n^\alpha, \hat{S}_m^\beta] = i\delta_{nm} \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_n^\gamma; \quad (1.2)$$

$$[\hat{S}_n^+, \hat{S}_m^-] = 2\hat{S}_n^z \delta_{n,m}; \quad (1.3)$$

$$[\hat{S}_n^+, \hat{S}_n^-] = 2S(S+1) - 2(\hat{S}_n^z)^2; \quad (1.4)$$

$$(\hat{S}_n^-)^{2S+1} = (\hat{S}_n^+)^{2S+1} = 0. \quad (1.5)$$

$\alpha, \beta$  mogu da uzmu vrednosti  $x, y, z$ ;  $S$  je vrednost spina;  $\delta_{n,m}$  Kronekerov simbol, dok  $\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$  predstavlja Levi-Čivita simbol. Sve navedene relacije su date za vrednost  $\hbar = 1$ , dakle, operatori spina su bezdimenziione veličine.

Primera radi, spinski hamiltonijan [3]

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{n,m} I_{n,m} \{ a(\hat{S}_n^x \hat{S}_m^x + \hat{S}_n^y \hat{S}_m^y) + b \hat{S}_n^z \hat{S}_m^z \} \quad (1.6)$$

omogućava da se, izborom različitih vrednosti parametara  $a$  i  $b$ , dobiju različiti modelni hamiltonijani:

- $a = b = 1$  - Hajzenbergov model,

- $a = 0, b = 1$  - Izingov model,
- $a = 1, b = 0$  - XY model.

U radu će biti razmatran isključivo Hajzenbergov model. Hamiltonian Hajzenbergovog modela se može kompaktno zapisati kao:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \{ \hat{S}_{\mathbf{n}}^x \hat{S}_{\mathbf{m}}^x + \hat{S}_{\mathbf{n}}^y \hat{S}_{\mathbf{m}}^y + \hat{S}_{\mathbf{n}}^z \hat{S}_{\mathbf{m}}^z \} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}}.\end{aligned}\quad (1.7)$$

Slučaj  $I > 0$  odgovara feromagnetnom, a slučaj  $I < 0$  antiferomagnetnom uređenju. Kada je  $I > 0$ , energija sistema je minimalna kada svi spinovi stoje paralelno, i to je tada osnovno stanje sistema. U suprotnom, za  $I < 0$ , osnovno stanje je kada su prvi susedi antiparalelni. U raznim praktičnim primenama, pojavila se ideja prelaska sa spinskim na bozonske operatore. Ove transformacije moraju biti takve da očuvavaju fizički relevantne komutacione relacije i srednje vrednosti. U upotrebi su različite bozonske reprezentacije, među kojima su Blohova (*Bloch*), Holštajn-Primakova (*Holstein-Primakoff*), Dajson-Maljejeva (*Dyson-Maleév*) reprezentacija, itd. Prelazak na bozonske (Boze) operatore je višestruko pogodan. Naime, na taj način, u nultoj aproksimaciji, dobija se neinteragujući sistem bozonskih kvazičestica, koji je dobro proučen u literaturi [3]. Poznato je da diskretna Furijeova (*Fourier*) transformacija ne održava komutacione relacije spinskih operatora. Sa druge strane, u slučaju bozonskih operatara, Furijeova transformacija je kanonska, odnosno, očuvava komutacione relacije [4, 5]. Za razumevanje postupka prelaska sa spinskim na funkcije bozonskih operatora, neophodno je temeljno poznavanje teorije konačnodimenzionalih vektorskih prostora [4–7]. Za početak, posmatra se skup od  $N$  spinskih operatora  $\{\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}\}$  pridruženih odgovarajućim čvorovima rešetke  $\mathbf{n}$ . Bazisne vektore pojedinačnog spinskog operatora označavamo sa  $|S, m\rangle_{\mathbf{n}}$ . Oni su definisani svojstvenim problemima:

$$\hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}}^2 |S, m\rangle_{\mathbf{n}} = S(S+1) |S, m\rangle_{\mathbf{n}} \quad (1.8)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^z |S, m\rangle_{\mathbf{n}} = m |S, m\rangle_{\mathbf{n}}. \quad (1.9)$$

Za proizvoljno odabranu vrednost spina  $S$ , vektorski prostor kojeg generišu bazisni vektori  $|S, m\rangle_{\mathbf{n}}$  je  $2S+1$ -dimenzion [4, 5]. Kako je u ovom prostoru definisan skalarni proizvod, reč je o Hilbertovom prostoru. Od interesa je sistem uređenih spinova, te je Hilbertov prostor celog sistema dat preko direktnog (tenzorskog, Kronekerovog) proizvoda [6] Hilbertovih prostora pojedinačnih spinova:

$$\mathcal{H}_S = \mathcal{H}_{S_1} \otimes \mathcal{H}_{S_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{S_N}. \quad (1.10)$$

Dimenzija Hilbertovog prostora sistema je

$$\dim \mathcal{H}_S = (2S_1 + 1)(2S_2 + 1)\dots(2S_N + 1). \quad (1.11)$$

S druge strane, skup bozonskih operatora koji zadovoljava komutacione relacije:

$$[\hat{B}_{\mathbf{n}}, \hat{B}_{\mathbf{m}}^\dagger] = \delta_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \quad (1.12)$$

$$[\hat{B}_n, \hat{B}_m] = [\hat{B}_n^\dagger, \hat{B}_m^\dagger] = 0 \quad (1.13)$$

deluje u bozonskom Hilbertovom prostoru

$$\mathcal{H}_B = \mathcal{H}_{B_1} \otimes \mathcal{H}_{B_2} \otimes \dots \otimes \mathcal{H}_{B_N}. \quad (1.14)$$

Bazis u svakom potprostoru čine vektori  $|n\rangle_n$  koji su svojstveni vektori operatora  $\hat{n}_n = \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n$  [4].

Da bi se izvršio korektan prelazak sa spinskih na bozonske operatore, potrebno je pronaći odgovarajuće funkcije bozonskih operatora <sup>1</sup> koje bi imale iste komutacione relacije kao  $\hat{S}^\pm$  i  $\hat{S}^z$ , i iste statističke srednje vrednosti <sup>2</sup> [4].

## 1.1 Blohova aproksimacija

Pri razmatranju kvantnih spinskih hamiltonijana često se vrši aproksimacija spinskih operatora bozonskim <sup>3</sup>. Najgrublja aproksimacija pri prelasku sa spinskih na bozonske operatore je poznata kao Blohova aproksimacija. U okviru nje, zanemaruje se interakcija spinskih talasa. Veza između spinskih i bozonskih operatora, u ovoj aproksimaciji, data je sa <sup>4</sup>

$$\hat{S}_n^- = \sqrt{2S} \hat{B}_n^\dagger; \quad (1.17)$$

$$\hat{S}_n^+ = \sqrt{2S} \hat{B}_n; \quad (1.18)$$

$$\hat{S}_n^z = S - \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \approx S. \quad (1.19)$$

Blohova aproksimacija daje dobre rezultate na niskim temperaturama, jer je, u tom slučaju,  $\langle \hat{S}^z \rangle \approx S$ . Stoga, može se reći da se na niskim temperaturama spinovi ponašaju kao bozoni. Ukoliko se ispituje širi temperaturski opseg, moraju se koristiti bozonske reprezentacije poput Holštajn-Primakovljeve i Dajson-Maljejevljeve.

## 1.2 Holštajn-Primakovljeva reprezentacija

Holštajn i Primakov su uveli sledeću bozonsku reprezentaciju spinskih operatora [2, 3, 8, 9]:

$$\hat{S}_n^+ = \sqrt{2S} \Phi(\hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n) \hat{B}_n; \quad (1.20)$$

---

<sup>1</sup>Funkcije bozonskih operatora, kao i sami bozonski operatori, deluju u prostoru  $\mathcal{H}_B$ .

<sup>2</sup>Operatori  $\hat{S}^\pm$  i  $\hat{S}^z$  deluju u Hilbertovom prostoru  $\mathcal{H}_S$ .

<sup>3</sup>Blohova aproksimacija nije primenljiva na klasične spinske hamiltonijane, npr. na klasični Izingov model.

<sup>4</sup>Može se videti da, ovakvim prelaskom na bozonske operatore, nisu zadovoljene komutacione relacije:

$$[\hat{S}_n^+, \hat{S}_m^-] = 2\hat{S}_n^z \delta_{n,m} \quad (1.15)$$

$$[\hat{S}_n^\pm, \hat{S}_m^z] = \mp \hat{S}_n^z \delta_{n,m}, \quad (1.16)$$

te, Blohova aproksimacija nije bozonska reprezentacija spinskih operatora.

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^- = \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \Phi(\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}); \quad (1.21)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^z = S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}; \quad (1.22)$$

gde je

$$\Phi(\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}) = \sqrt{1 - \frac{\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}}{2S}}. \quad (1.23)$$

Kada svojstvena vrednost  $n_{\mathbf{n}}$  operatora  $\hat{n}_{\mathbf{n}} = \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}$  pređe vrednost  $2S$ , imamo tzv. nefizička stanja [3]. Stoga su samo svojstvene vrednosti  $n_{\mathbf{n}} = 0, 1, \dots, 2S$  od fizičkog značaja. Kvadratni koren u izrazu (1.23) je samo simbol za binomni razvoj

$$\Phi(\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}) = 1 - \frac{\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}}{4S} - \frac{(\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}})^2}{32S^2} - \frac{(\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}})^3}{128S^3} - \frac{5(\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}})^4}{2048S^4} - \dots \quad (1.24)$$

S obzirom da se koren razvija u red, ova aproksimacija je utoliko bolja ukoliko je vrednost spina veća. Zadržavanjem na prvom članu razvoja (1.24), reprezentacija postaje Blohova, te je, kao takva, pogodna za prelazak sa spinskih na bozonske operatore na niskim temperaturama. Za opisivanje šireg temperaturskog opsega, moraju se uzeti i viši članovi razvoja. Problem sa reprezentacijom Holštajn-Primakova je što razvoj (1.24) sadrži beskonačno mnogo članova. U praktičnim primenama, pri prelasku sa spinskih na bozonske hamiltonijane, zadržavamo se na konačno mnogo članova, čime se neznatno krše komutacione relacije za  $\hat{S}^\pm$  i  $\hat{S}^z$ .

### 1.3 Dajson-Maljejevljeva reprezentacija

Primer neermitske bozonske reprezentacije je reprezentacija Dajson-Maljejeva [2, 3, 5, 9]:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^+ = \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}; \quad (1.25)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^- = \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \left(1 - \frac{\hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}}{2S}\right); \quad (1.26)$$

$$\hat{S}_{\mathbf{n}}^z = S - \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}. \quad (1.27)$$

Reprezentacija je neermitska, jer je

$$(\hat{S}_{\mathbf{n}}^+)^* = \sqrt{2S} \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \neq \hat{S}_{\mathbf{n}}^-. \quad (1.28)$$

Ova reprezentacija nema problema sa nefizičkim stanjima, niti operatorskim redom. Manjkavost ove reprezentacije je usled toga što se, pri prelasku sa spinskog na bozonski hamiltonijan, dobija neermitski bozonski hamiltonijan. U radu [10] je pokazano da, u slučaju kvantnog Hajzenbergovog modela, neermitovost ove reprezentacije ne utiče na određivanje korelacionih funkcija <sup>5</sup>.

---

<sup>5</sup>Rezultat za korelacione funkcije u okviru ove reprezentacije se poklapa sa rezultatom dobijenim dijagramskom tehnikom.

## Glava 2

# Hajzenbergov hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji

Izotropni Hajzenbergov model definisan je hamiltonijanom:

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \{ \hat{S}_{\mathbf{n}}^x \hat{S}_{\mathbf{m}}^x + \hat{S}_{\mathbf{n}}^y \hat{S}_{\mathbf{m}}^y + \hat{S}_{\mathbf{n}}^z \hat{S}_{\mathbf{m}}^z \} \\ &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{n}} \cdot \hat{\mathbf{S}}_{\mathbf{m}}.\end{aligned}\quad (2.1)$$

Da bi se izvršila bozonizacija, neophodno je preći na operatore podizanja i spuštanja projekcije spina  $\hat{S}^\pm = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y$ . Odgovarajuće inverzne relacije su:

$$\hat{S}^x = \frac{\hat{S}^+ + \hat{S}^-}{2}; \quad (2.2)$$

$$\hat{S}^y = \frac{\hat{S}^+ - \hat{S}^-}{2i}. \quad (2.3)$$

Ubacivanjem izraza (2.2) i (2.3) u (2.1), dobija se

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \left\{ \left( \frac{\hat{S}_{\mathbf{n}}^+ + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-}{2} \right) \left( \frac{\hat{S}_{\mathbf{m}}^+ + \hat{S}_{\mathbf{m}}^-}{2} \right) + \left( \frac{\hat{S}_{\mathbf{n}}^+ - \hat{S}_{\mathbf{n}}^-}{2i} \right) \left( \frac{\hat{S}_{\mathbf{m}}^+ - \hat{S}_{\mathbf{m}}^-}{2i} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^z \hat{S}_{\mathbf{m}}^z \right\}, \quad (2.4)$$

što nakon sređivanja daje

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \left( \hat{S}_{\mathbf{n}}^- \hat{S}_{\mathbf{m}}^+ + \hat{S}_{\mathbf{n}}^z \hat{S}_{\mathbf{m}}^z \right). \quad (2.5)$$

Bozonizacijom hamiltonijana u okviru Blohove aproksimacije, dobija se

$$\begin{aligned}\hat{H} &= -\frac{1}{2} \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \left\{ S^2 + 2S \left( \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{m}} - \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}} \right) + \mathcal{O}(\hat{B}^4) \right\} \\ &= -\frac{1}{2} S^2 \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} - S \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{m}} + S \sum_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} I_{\mathbf{n}, \mathbf{m}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{n}}.\end{aligned}\quad (2.6)$$

U aproksimaciji najbližih suseda, gde vektori  $\{\lambda\}$  povezuju najbliže susede, hamiltonijan postaje

$$\hat{H} = -\frac{1}{2}S^2 \sum_{n,\lambda} I_{n,n+\lambda} - S \sum_{n,\lambda} I_{n,n+\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} + S \sum_{n,\lambda} I_{n,n+\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n. \quad (2.7)$$

Stavljući  $I_{n,n+\lambda} = I$ , dobija se

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2}S^2 I \sum_{n,\lambda} 1 - SI \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} + SI \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \\ &= -\frac{1}{2}S^2 INz - SI \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} + SIz \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \\ &= \hat{H}_0 - SI \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} + SIz \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n, \end{aligned} \quad (2.8)$$

gde je  $N$  broj čvorova rešetke, a  $z$  broj prvih suseda. Kao što je pokazano u [4], ovaj hamiltonijan se dijagonalizuje Furije transformacijom. U tom slučaju se dobija

$$\hat{\mathbb{H}} = \hat{\mathbb{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}}, \quad (2.9)$$

gde je  $E(\mathbf{k}) = SIz(1 - \gamma(\mathbf{k}))$  disperzija spinskih talasa (magnona) koja zavisi od geometrije direktnе rešetke. Ta zavisnost se oslikava kroz veličinu

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\lambda}, \quad (2.10)$$

koja zavisi od koordinata najbližih suseda i naziva se geometrijskim faktorom.

## 2.1 Disperzija u aproksimaciji prvih i drugih suseda

U aproksimaciji prvih i drugih suseda, hamiltonijan (2.6) postaje

$$\begin{aligned} \hat{H} &= -\frac{1}{2}S^2 \sum_{n,\lambda} I_{n,n+\lambda} - \frac{1}{2}S^2 \sum_{n,\delta} I_{n,n+\delta} - S \sum_{n,\lambda} I_{n,n+\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} - S \sum_{n,\delta} I_{n,n+\delta} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\delta} \\ &\quad + S \sum_{n,\lambda} I_{n,n+\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n + S \sum_{n,\delta} I_{n,n+\delta} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n, \end{aligned} \quad (2.11)$$

gde vektori  $\lambda$  povezuju najbliže, a vektori  $\delta$  sledeće najbliže<sup>1</sup> susede. Uzimajući da su  $I_{n,n+\lambda} = I_1$  i  $I_{n,n+\delta} = I_2$ , dobija se

$$\begin{aligned}
\hat{H} &= -\frac{1}{2}S^2I_1 \sum_{n,\lambda} 1 - \frac{1}{2}S^2I_2 \sum_{n,\delta} 1 - SI_1 \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} - SI_2 \sum_{n,\delta} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\delta} \\
&+ SI_1 \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n + SI_2 \sum_{n,\delta} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \\
&= \underbrace{-\frac{1}{2}S^2I_1 Nz_1 - \frac{1}{2}S^2I_2 Nz_2}_{\hat{H}_0} - SI_1 \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} - SI_2 \sum_{n,\delta} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\delta} \\
&+ SI_1 z_1 \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n + SI_2 z_2 \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \\
&= \hat{H}_0 - SI_1 \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} - SI_2 \sum_{n,\delta} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\delta} + SI_1 z_1 \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \\
&+ SI_2 z_2 \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n,
\end{aligned} \tag{2.12}$$

gde je  $N$  broj čvorova rešetke, a  $z_1$  i  $z_2$  broj prvih, odnosno drugih suseda. Ovaj hamiltonijan se dijagonalizuje Furije transformacijom na način kao što je prikazano u Dodatku A. U tom slučaju se dobija

$$\hat{\mathbb{H}} = \hat{\mathbb{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} E(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}}, \tag{2.13}$$

gde je

$$E(\mathbf{k}) = SI_1 z_1 (1 - \gamma(\mathbf{k})) + SI_2 z_2 (1 - \tilde{\gamma}(\mathbf{k})). \tag{2.14}$$

Geometrija rešetke ima uticaj na disperziju kroz faktore

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{z_1} \sum_{\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\lambda}; \tag{2.15}$$

$$\tilde{\gamma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{z_2} \sum_{\delta} e^{i\mathbf{k}\cdot\delta}, \tag{2.16}$$

koji su dati u Dodatku B.

---

<sup>1</sup>eng. *next-nearest neighbours*

## 2.2 Izraz za relativnu magnetizaciju u Blohovoj aproksimaciji

Ideja kvantne teorije feromagnetizma je zasnovana na pretpostavci da su na  $T = 0$  svi spinovi paralelno orijentisani i da su z-projekcije spinova svih atoma jednake maksimalnoj vrednosti spina  $S$  [1]. Tada i srednja vrednost  $\langle \hat{S}_n^z \rangle$  ima maksimum. Povećanjem temperature, ova srednja vrednost se smanjuje, i na kritičnoj (Kirijevoj) temperaturi  $T_c$  je jednaka nuli. Temperatura  $T_c$  je temperatura faznog prelaza feromagnetik-paramagnetik, a parametar uređenosti  $\langle \hat{S}_n^z \rangle$  je magnetizacija. Promenu magnetizacije sa temperaturom najlakše je pratiti preko relativne magnetizacije [1]

$$\sigma = \frac{\langle \hat{S}_n^z \rangle}{S}. \quad (2.17)$$

Da bi se došlo do izraza za relativnu magnetizaciju u Blohovoj aproksimaciji, koristi se sledeća matematička dosetka:

$$\sigma = \frac{\langle \hat{S}_n^z \rangle}{S} = \frac{\langle S - (S - \hat{S}_n^z) \rangle}{S} = \frac{\langle S - (S - S + \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n) \rangle}{S} = 1 - \frac{\langle \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \rangle}{S}. \quad (2.18)$$

Primenom diskretnih Furije transformacija na bozonske operatore koji figurišu u (2.18) dobija se:

$$\begin{aligned} \langle \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \rangle &= \left\langle \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}} \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \left\langle \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{n}} \right\rangle \\ &= \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{n}} \langle \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{q}} \rangle. \end{aligned} \quad (2.19)$$

U Blohovoj aproksimaciji, hamiltonijan je dijagonalan po  $\hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}}$ , te, stoga, mora važiti [4]:

$$\langle \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{q}} \rangle = \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \langle \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.20)$$

Ubacivanjem (2.20) u (2.19), izraz za relativnu magnetizaciju postaje

$$\sigma = 1 - \frac{1}{NS} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}} \rangle. \quad (2.21)$$

Znajući da se radi o idealnom gasu bozonskih kvazičestica, opšta formula za određivanje relativne magnetizacije u Blohovoj aproksimaciji je

$$\sigma = 1 - \frac{1}{NS} \sum_{\mathbf{k}} \left[ e^{\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T}} - 1 \right]^{-1}. \quad (2.22)$$

U cilju dobijanja operativnog izraza za računanje relativne magnetizacije, u relaciji (2.22) se vrši prelaz sa sume na integral, prema pravilu [4]

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \longrightarrow \frac{V_{\text{ee}}}{(2\pi)^3} \int F(\mathbf{k}) d^3\mathbf{k}, \quad (2.23)$$

gde je  $V_{\text{el}}$  zapremina elementarnećelije direktne rešetke, dok se integracija vrši po I Briluenovoj zoni. Za prostu kubnu rešetku, granice integracije u trostrukom integralu su  $-\pi/a, \pi/a$ .

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x dk_y dk_z [e^{\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T}} - 1]^{-1}. \quad (2.24)$$

U prethodnom izrazu (2.24) prelazi se sa Dekartovih na sferne koordinate, i, pri tome se I Briluenova zona aproksimira sferom odgovarajuće zapremine. Gornja granica integracije po  $k$  određuje se na osnovu jednakosti odgovarajućih zapremina [4]:

$$\frac{4}{3} k_m^2 \pi = \left( \frac{2\pi}{a} \right)^3, \quad (2.25)$$

odakle sledi

$$k_m = \sqrt{\frac{6\pi^2}{a^3}} \quad (2.26)$$

Dakle,

$$\begin{aligned} \sigma &= 1 - \frac{1}{S(2\pi)^3} \int_0^{k_m} dk k^2 \int_0^\pi d\theta \sin \theta \int_0^{2\pi} d\varphi [e^{\frac{SIk^2a^2}{k_B T}} - 1]^{-1} \\ &= 1 - \frac{1}{S} \frac{a^3}{2\pi^2} \int_0^{k_m} dk k^2 [e^{\frac{SIk^2a^2}{k_B T}} - 1]^{-1} \end{aligned} \quad (2.27)$$

Koristeći smenu  $\frac{SIk^2a^2}{k_B T} = x$ , dobija se

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S} \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{k_B T}{SI} \right)^{\frac{3}{2}} \int_0^{x_m} dx \sqrt{x} [e^x - 1]^{-1}. \quad (2.28)$$

U slučaju niskih temperatura, gornju granicu integracije možemo zameniti sa  $\infty$ :

$$\sigma \approx 1 - \frac{1}{S} \frac{1}{4\pi^2} \left( \frac{k_B T}{SI} \right)^{\frac{3}{2}} \underbrace{\int_0^\infty dx \sqrt{x} [e^x - 1]^{-1}}_I. \quad (2.29)$$

Rešenje integrala iz prethodne relacije<sup>2</sup> je  $I = \frac{\sqrt{\pi}}{2} \zeta\left(\frac{3}{2}\right)$ . Stoga,

$$\sigma \approx 1 - \frac{1}{S} \left( \frac{k_B T}{4\pi SI} \right)^{\frac{3}{2}} \zeta\left(\frac{3}{2}\right). \quad (2.30)$$

Ovo je poznati Blohov rezultat koji opisuje niskotemperatursko ponašanje relativne magnetizacije [1, 11].

---

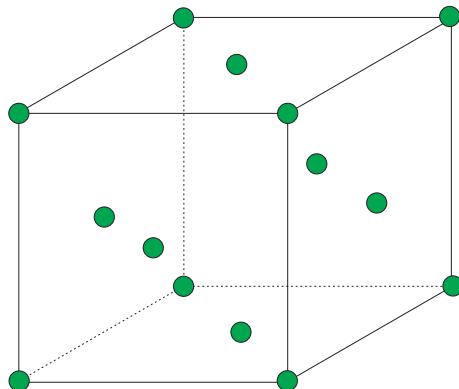
<sup>2</sup>Rešenje integrala:  $I(\alpha) = \int_0^\infty \frac{x^\alpha}{e^x - 1} dx = \Gamma(\alpha + 1)\zeta(\alpha + 1)$ . Videti [6].

# Glava 3

## Određivanje integrala izmene iz disperzije na primeru EuO

### 3.1 Osobine izotropnog feromagneta EuO

Decenijama unazad je poznato da se magnetne osobine halkogenida europijuma (EuO, EuS, EuSe, EuTe) mogu opisivati polazeći od izotropnog Hajzenbergovog modela [12]. U ovim magnetnim dielektricima<sup>1</sup>, magnetni  $\text{Eu}^{2+}$  joni (u  ${}^8\text{S}_{7/2}$  spinskim stanjima) formiraju površinski centriranu kubnu rešetku<sup>2</sup>. Dva pomenuta halkogenida, EuO i EuS, predstavnici su feromagnetnih materijala<sup>3</sup> [12]. U ovom poglavlju, akcenat će biti stavljen na EuO. Rastojanje između najbližih suseda u magnetnoj elementarnoj čeliji<sup>4</sup>, za razmatrani halkogenid je  $3.64 \text{ \AA}$  [17]. Ova vrednost daje parametar magnetne elementarne čelije  $a = 5.15 \text{ \AA}$ . S druge strane, noviji računi [18] pokazuju da je minimum energije za balk uzorak EuO ostvaren za vrednost parametra  $a = 5.1578 \text{ \AA}$ .



Sl. 1: Magnetna elementarna čelija površinski centrirane kubne rešetke. Zeleni kružići predstavljaju jone europijuma.

<sup>1</sup>Pomenuti halkogenidi europijuma su magnetni dielektrični, te je zbog toga na njih primenljiv Hajzenbergov model.

<sup>2</sup>Europijum spada u lantanoide. Njegova elektronska konfiguracija je  $[\text{Xe}] 4f^7 6s^2$ . Kako nepotpunjena  $f$  ljeska sadrži  $\tilde{z} = 7$  elektrona, na osnovu Hundovog pravila, spin je  $S = \tilde{z}/2 = 7/2$ .

<sup>3</sup>U lokalizovanim spinskim sistemima (magnetnim izolatorima) koji su opisani Hajzenbergovim modelom, feromagnetne supstance su retkost u poređenju sa antiferomagnetnim [13]. Još neki od predstavnika feromagnetnih izolatora su  $\text{K}_2\text{CuF}_4$  [14],  $\text{TMCuC}$  [15, 16] i  $\text{C}_{13}\text{H}_{16}\text{N}_3\text{O}_4$ , kao primer organskog feromagneta [13].

<sup>4</sup>U ovom radu se pod prvim i drugim susedima uvek podrazumevaju susedi u magnetnoj rešetki.

## 3.2 Disperzija duž različitih pravaca u recipročnoj rešetki

U prethodnoj glavi, dat je izraz za disperziju u Blohovoj aproksimaciji, u slučaju interakcije između najблиžih suseda, u formi

$$E(\mathbf{k}) = SIz(1 - \gamma(\mathbf{k})). \quad (3.1)$$

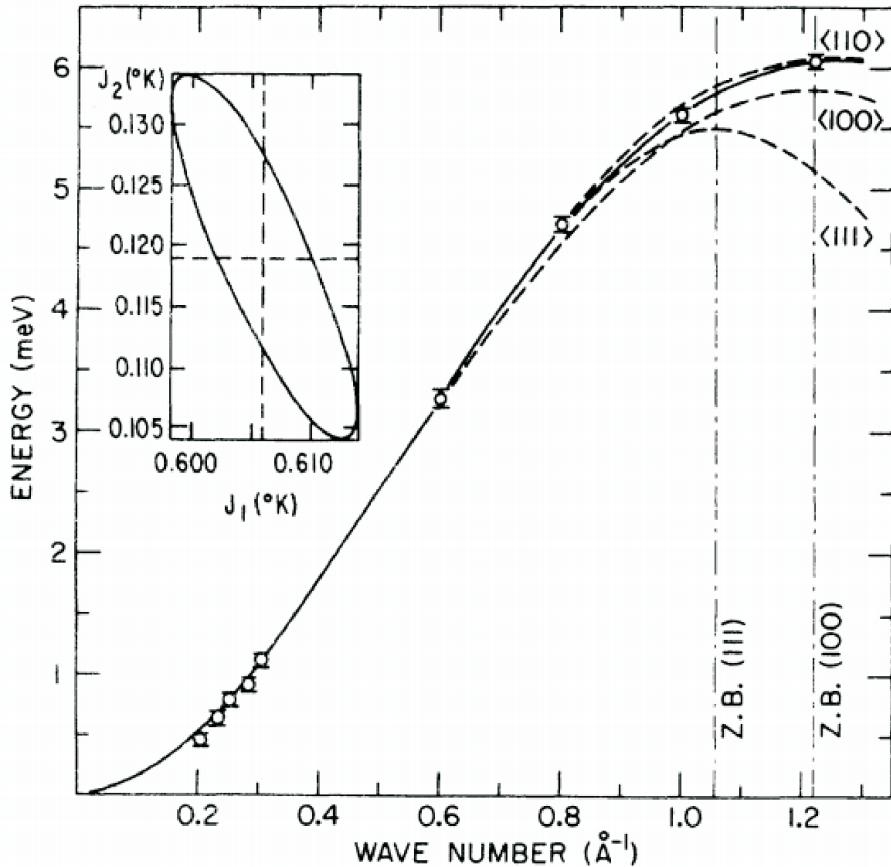
Za EuO,  $S = 7/2$ ,  $z = 12$ , dok je

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{zI} J(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right], \quad (3.2)$$

što je dato u Dodatku B. Stoga, Blohova disperzija u slučaju EuO ima formu

$$E(\mathbf{k}) = 42I \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right] \right\}. \quad (3.3)$$

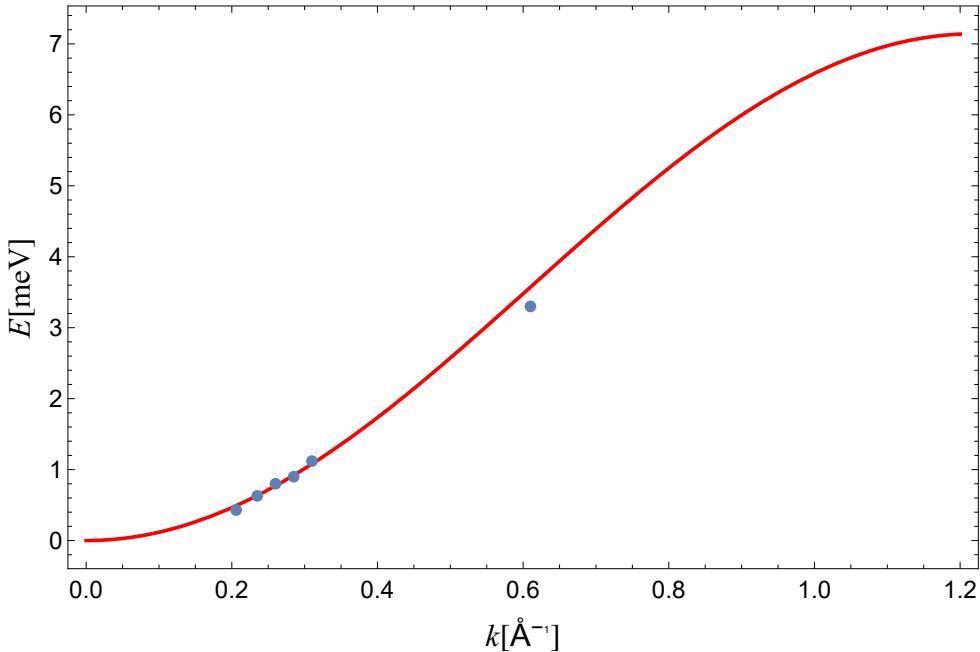
Eksperimentalna disperzija za EuO data je na Sl.2. Može se primetiti prilična izotropnost disperzije, koja se ogleda u sličnosti disperzionih krivih duž pravaca  $\langle 100 \rangle$ ,  $\langle 110 \rangle$ ,  $\langle 111 \rangle$  unutar recipročne rešetke.



Sl. 2: Zavisnost  $E(\mathbf{k})$  duž različitih pravaca u recipročnoj rešetki. Grafik je preuzet iz [12].

U cilju određivanja parametara  $I$  iz izraza (3.3), korišćene su tri tačke sa grafika na Sl.2. Fiksiран je pravac  $\langle 100 \rangle$  i odabrane su tačke:  $(0.31 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, 1.12 \text{ meV})$ ,  $(0.61 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, 3.30 \text{ meV})$ ,

$(0.26 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, 0.80 \text{ meV})$ , koje leže na krivoj  $E(k_x)$ . Navedenim tačkama odgovaraju, respektivno, integrali izmene:  $I_1 = 0.132433 \text{ meV}$ ,  $I_2 = 0.117863 \text{ meV}$ ,  $I_3 = 0.132356 \text{ meV}$ . U daljem računu će se koristiti srednja vrednost  $I = 0.127551 \text{ meV}$  datih vrednosti integrala izmene. Ova vrednost integrala izmene među najbližim susedima, izražena u kelvinima, iznosi  $\mathcal{I} = \frac{I}{k_B} = 1.47885 \text{ K}$ . Na insetu Sl.2, na osama se nalaze integrali izmene između prvih i drugih suseda<sup>5</sup>  $\mathcal{I}'_{1P}$  i  $\mathcal{I}'_{2P}$ . U radu [12] dato je da su vrednosti integrala izmene između najbližih suseda, i sledećih najbližih suseda  $\mathcal{I}'_{1P} = \frac{I'_{1P}}{k_B} = (0.606 \pm 0.008) \text{ K}$  i  $\mathcal{I}'_{2P} = \frac{I'_{2P}}{k_B} = (0.119 \pm 0.015) \text{ K}$ . Kako u radu [12] nemaju faktor  $1/2$  u hamiltonijanu (2.1), da bi se izvršila usporedba sa rezultatima iz ovog rada, treba skalirati rezultate faktorom 2. Nadalje, biće uzeto da su integrali izmene iz [12],  $\mathcal{I}_{1P} = 2\mathcal{I}'_{1P} = \frac{2I'_{1P}}{k_B} = (1.212 \pm 0.016) \text{ K}$  i  $\mathcal{I}_{2P} = 2\mathcal{I}'_{2P} = \frac{2I'_{2P}}{k_B} = (0.238 \pm 0.030) \text{ K}$ .



Sl. 3: Disperzija duž pravca  $\langle 100 \rangle$ . Crvenom bojom je predstavljena teorijska kriva za vrednost integrala izmene  $I = 0.127551 \text{ meV}$ . Plave tačke su eksperimentalne tačke sa Sl.2, koje leže duž pravca  $\langle 100 \rangle$ .

Na Sl.3 crvenom bojom je prikazana teorijska kriva

$$E(k_x) = 28I \left\{ 1 - \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \right\}, \quad (3.4)$$

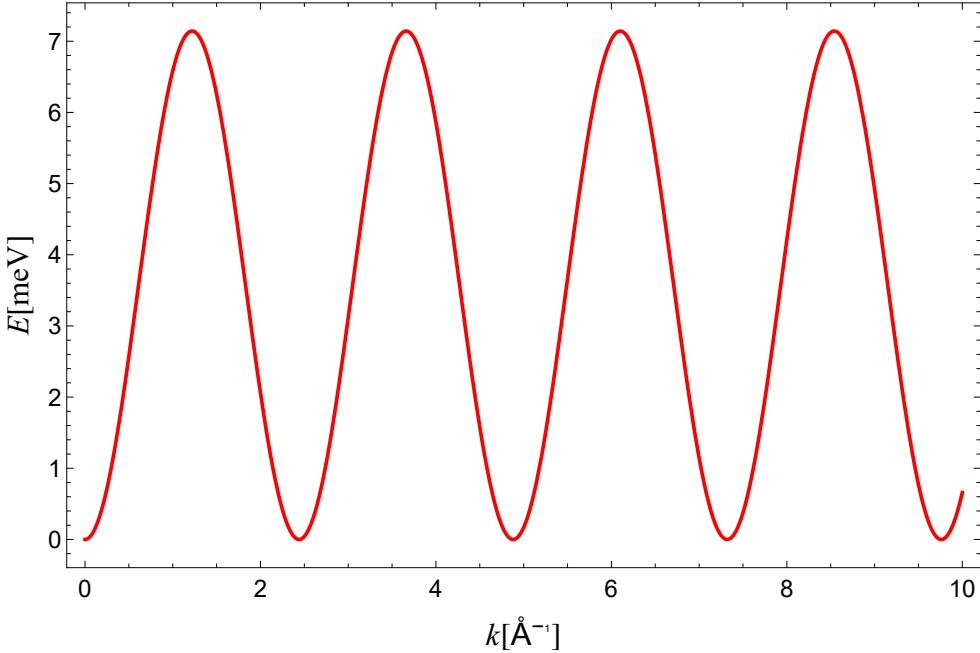
dobijena uz korišćenje integrala izmene  $I = 0.127551 \text{ meV}$ . Kako je na apscisi na Sl.2 dat intenzitet talasnog vektora, zgodno je u relaciji (3.4) preći sa argumenta  $k_x$  na argument  $|\mathbf{k}| = k$ . S obzirom na to da je ova zavisnost za pravac  $\langle 100 \rangle$ , duž kog važi  $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + 0^2 + 0^2} = k_x$ , navedeni prelazak je trivijalan:

$$E(k) = 28I \left\{ 1 - \cos \left( \frac{ka}{2} \right) \right\}. \quad (3.5)$$

---

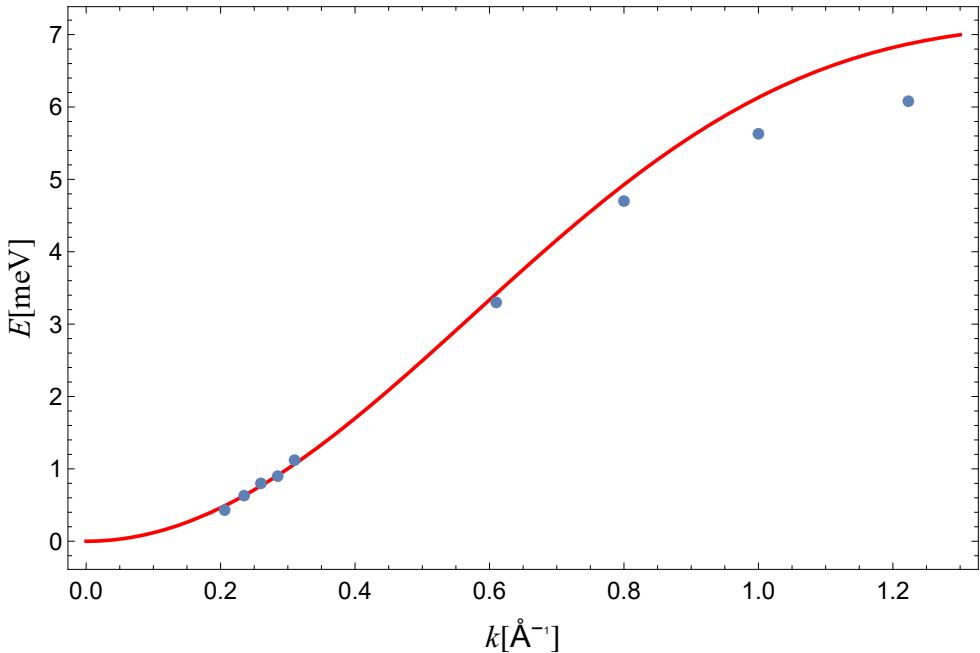
<sup>5</sup>Na Sl.2 koja je preuzeta iz rada [12], odgovarajući integrali izmene su označeni sa  $J_1$  i  $J_2$ . Kako se u ovom radu oznaka  $J$  koristi za diskretnu Furije transformaciju integrala izmene, umesto  $J_1$  i  $J_2$ , u daljem tekstu, koristiće se označke  $\mathcal{I}'_{1P}$  i  $\mathcal{I}'_{2P}$ .

Plave tačke predstavljaju rezultate merenja duž pravca  $\langle 100 \rangle$ , preuzete sa Sl.2.



Sl. 4: Teorijska disperzija duž pravca  $\langle 100 \rangle$ , dobijena za vrednost integrala izmene  $I = 0.127551 \text{ meV}$ .

Na Sl.4 prikazana je teorijska zavisnost (3.5) za širi interval intenziteta  $\mathbf{k}$ -vektora. Funkcija je periodična i sve vrednosti energije  $E(k)$  nalaze se unutar I Briluenove zone. Sudeći po Sl.4, sve vrednosti  $E(k)$  će se naći u intervalu  $[0, 1.2131 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}]$ .



Sl. 5: Disperzija duž pravca  $\langle 110 \rangle$ . Crvenom bojom je predstavljena teorijska kriva za vrednost integrala izmene  $I = 0.127551 \text{ meV}$ . Plave tačke su eksperimentalne tačke sa Sl.2, koje leže duž pravca  $\langle 110 \rangle$ .

Disperzija duž pravca  $\langle 110 \rangle$  predstavljena je crvenom krivom na Sl.5, za vrednost integrala izmene  $I = 0.127551$  meV. Duž ovog pravca,  $k_x = k_y$ , te je  $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + 0^2} = \sqrt{2} k_x$ . Tada je

$$E(k_x, k_x, 0) = E(k_x) = 42I \left\{ 1 - \frac{1}{3} \cos^2 \left( \frac{k_x a}{2} \right) - \frac{2}{3} \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \right\}. \quad (3.6)$$

S obzirom na to da se na apscisi, na Sl.2, nalazi intenzitet talasnog vektora, da bi bilo moguće poreediti teorijski rezultat sa eksperimentalnim podacima, prelazi se na

$$E(k) = 42I \left\{ 1 - \frac{1}{3} \cos^2 \left( \frac{\sqrt{2}}{4} ka \right) - \frac{2}{3} \cos \left( \frac{\sqrt{2}}{4} ka \right) \right\}. \quad (3.7)$$

Eksperimentalni podaci, označeni plavom bojom na Sl.5, ne slažu se dobro sa krivom (3.7) za velike vrednosti intenziteta talasnog vektora. Samim tim, model koji uključuje isključivo interakciju među najbližim susedima, ne može biti korišćen za opis EuO.

### 3.3 Fitovanje disperzije polazeći od hamiltonijana koji sadrži interakciju prvih i drugih suseda

Polazeći od hamiltonijana (2.11) i uzimajući u obzir da prvi susedi interaguju integralom izmene  $I_1$ , a drugi integralom izmene  $I_2$ , disperzija ima oblik

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right] \right\} \\ &+ 21I_2 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (3.8)$$

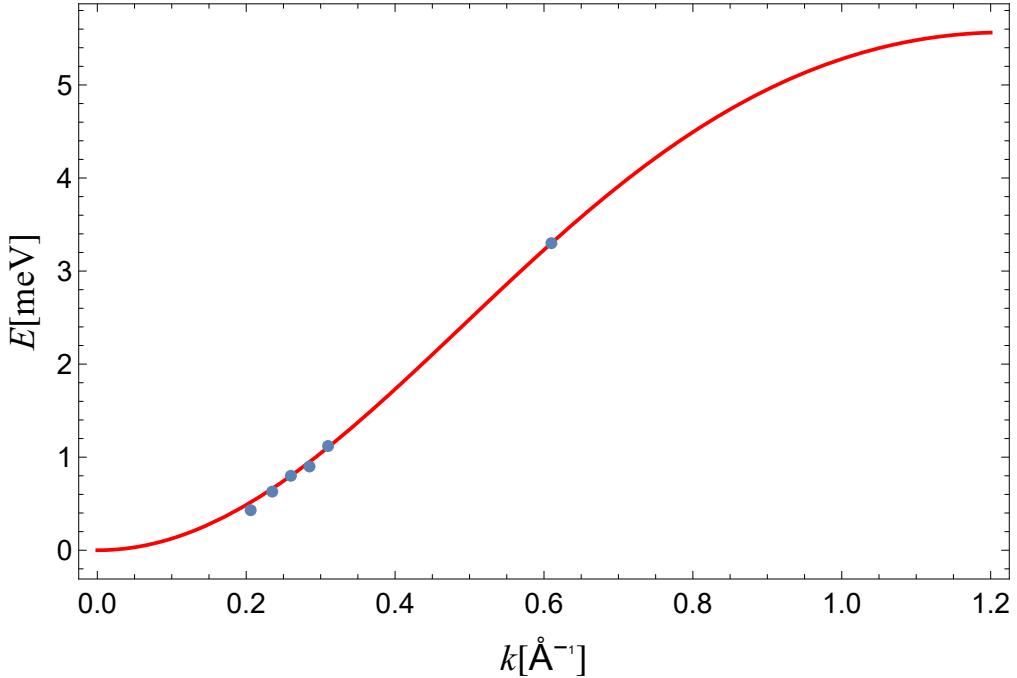
Duž pravca  $\langle 100 \rangle$  teorijska disperzija postaje

$$E(\mathbf{k}) = E(k_x, 0, 0) = E(k_x) = 28I_1 \left[ 1 - \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \right] + 7I_2 \left[ 1 - \cos(k_x a) \right]. \quad (3.9)$$

Na Sl.2, na apscisi, dat je intenzitet talasnog vektora  $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + k_z^2}$ . Duž pravca  $\langle 100 \rangle$ ,  $k = k_x$ , odnosno

$$E(k) = 28I_1 \left[ 1 - \cos \left( \frac{ka}{2} \right) \right] + 7I_2 \left[ 1 - \cos(ka) \right]. \quad (3.10)$$

Kako u relaciji (3.10) figurišu dva integrala izmene (dve nepoznate), potrebne su dve jednačine da bi oni bili određeni. Da bi se dobole te jednačine, uzete su dve eksperimentalno dobijene tačke sa pravca  $\langle 100 \rangle$  (Sl.2), čije su koordinate  $(0.61 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, 3.30 \text{ meV})$ ,  $(0.26 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, 0.80 \text{ meV})$ . Rešavanjem ovog sistema jednačina, po  $I_1$  i  $I_2$ , dobije se  $I_1 = 0.0993772$  meV i  $I_2 = 0.036969$  meV. Na Sl.6, crvenom bojom prikazana je teorijska kriva sa ovako dobijenim integralima izmene. Plave tačke predstavljaju rezultate merenja duž pravca  $\langle 100 \rangle$ , uzete sa Sl.2.



Sl. 6: Teorijska disperzija duž pravca  $\langle 100 \rangle$ , dobijena za vrednost integrala izmene  $I_1 = 0.0993772$  meV i  $I_2 = 0.036969$  meV. Plavom bojom su prikazane eksperimentalne tačke duž pravca  $\langle 100 \rangle$ , uzete sa Sl.2.

S druge strane, duž pravca  $\langle 110 \rangle$ ,  $k_x = k_y$ , te je  $k = |\mathbf{k}| = \sqrt{k_x^2 + k_y^2 + 0^2} = \sqrt{2} k_x$ . Stoga je

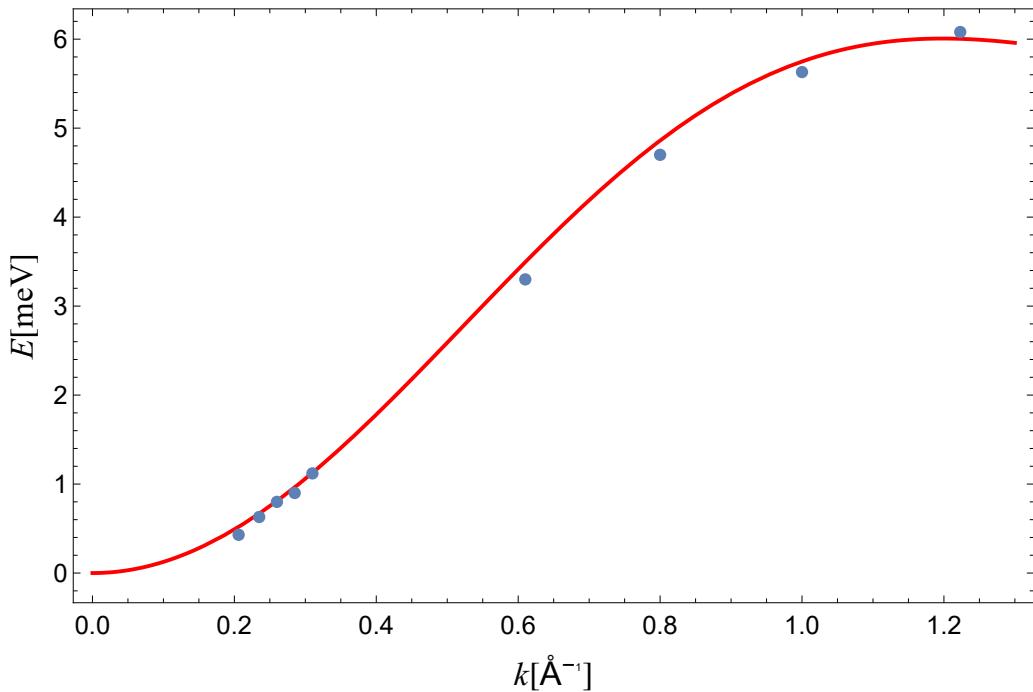
$$E(k_x, k_x, 0) = E(k_x) = 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \cos^2 \left( \frac{k_x a}{2} \right) - \frac{2}{3} \cos \left( \frac{k_x a}{2} \right) \right\} + 14I_2 \left\{ 1 - \cos \left( k_x a \right) \right\}. \quad (3.11)$$

Kako se na apscisi, na Sl.2, nalazi intenzitet talasnog vektora, da bi bilo moguće poređiti teorijski rezultat sa eksperimentalnim podacima, prelazi se na

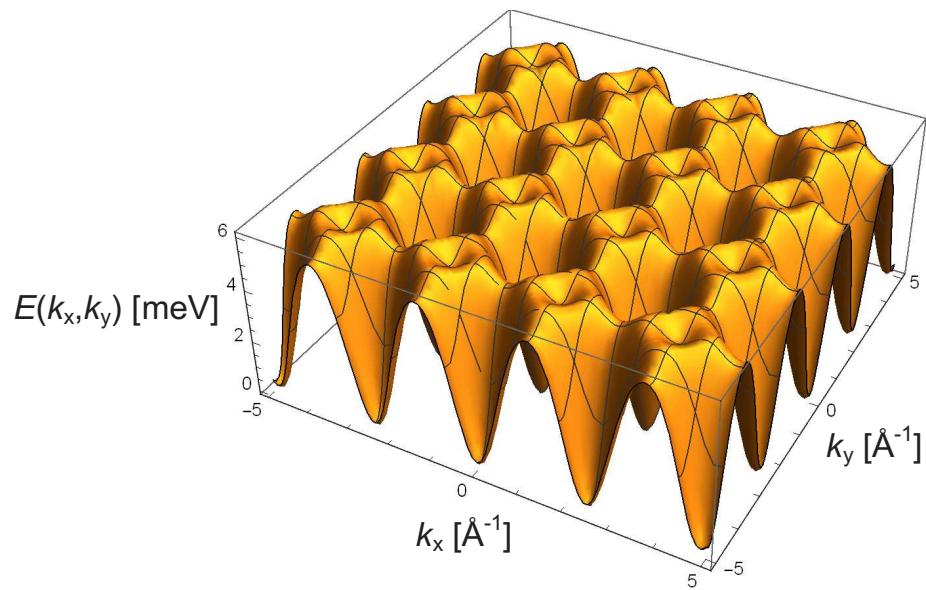
$$E(k) = 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \cos^2 \left( \frac{\sqrt{2}}{4} ka \right) - \frac{2}{3} \cos \left( \frac{\sqrt{2}}{4} ka \right) \right\} + 14I_2 \left\{ 1 - \cos \left( \frac{\sqrt{2}}{2} ka \right) \right\}. \quad (3.12)$$

Na Sl.7, crvenom bojom prikazana je zavisnost (3.12) za vrednosti integrala izmene  $I_1 = 0.0993772$  meV i  $I_2 = 0.036969$  meV, koji su određeni sa pravca  $\langle 100 \rangle$ . Plavom bojom su prikazane eksperimentalne tačke duž pravca  $\langle 110 \rangle$ . Vidi se da teorijski fit na Sl.7, prilično dobro reproducuje eksperimentalne podatke u širokom opsegu intenziteta vektora  $\mathbf{k}$ , duž pravca  $\langle 110 \rangle$ . Na osnovu toga, može se prepostaviti da integrali izmene određeni na osnovu eksperimentalnih tačaka sa pravca  $\langle 100 \rangle$  dobro opisuju disperziju EuO, i možemo ih koristiti za računanje magnetizacije.

Na Sl. 8 prikazana je zavisnost magnonske disperzije  $E(k_x, k_y, 0)$ . Sa nje se lepo može uočiti periodičnost i može se videti da disperzija nema procep (gap), odnosno kada  $\mathbf{k} \rightarrow \mathbf{0}$ ,  $E(\mathbf{k}) \rightarrow 0$ .



Sl. 7: Teorijska disperzija duž pravca  $\langle 110 \rangle$ , dobijena za vrednost integrala izmene  $I_1 = 0.0993772$  meV i  $I_2 = 0.036969$  meV. Plavom bojom su prikazane eksperimentalne tačke duž pravca  $\langle 110 \rangle$ , uzete sa Sl.2.



Sl. 8: Magnonska disperzija  $E(k_x, k_y, 0)$  za vrednosti integrala izmene kao na Sl.7.

Za male vrednosti intenziteta talasnog vektora, disperzija (3.8) je izotropna i proporcionalna  $k^2$ . To se može pokazati zadržavanjem dva prva člana u razvoju kosinusa<sup>6</sup> u (3.8):

$$\begin{aligned}
 E(\mathbf{k}) &= 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_y a}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_x a}{2} \right)^2 + 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_z a}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_x a}{2} \right)^2 \right. \right. \\
 &\quad \left. \left. + 1 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_y a}{2} \right)^2 - \frac{1}{2} \left( \frac{k_z a}{2} \right)^2 \right] \right\} + 21I_2 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ 1 - \frac{1}{2} (k_x a)^2 + 1 - \frac{1}{2} (k_y a)^2 + 1 - \frac{1}{2} (k_z a)^2 \right] \right\} \\
 &= 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ 3 - \frac{a^2}{4} k_y^2 - \frac{a^2}{4} k_x^2 - \frac{a^2}{4} k_z^2 \right] \right\} + 21I_2 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ 3 - \frac{a^2}{2} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \right] \right\} \\
 &= 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ 3 - \frac{a^2}{4} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \right] \right\} + 21I_2 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ 3 - \frac{a^2}{2} (k_x^2 + k_y^2 + k_z^2) \right] \right\}. \quad (3.13)
 \end{aligned}$$

Nakon sređivanja relacije (3.13), dobija se izraz za disperziju<sup>7</sup>:

$$E(\mathbf{k}) = \frac{7}{2} (I_1 + I_2) a^2 k^2 = S (I_1 + I_2) a^2 k^2. \quad (3.16)$$

Sl.9 pruža objašnjenje zašto eksperimentalne tačke, za male vrednosti intenziteta vektora  $\mathbf{k}$  duž različitih pravaca, leže na istoj krivoj. To je iz razloga što je disperzija za male vrednosti talasnog vektora izotropna. Zbog toga je za određivanje integrala izmene  $I_1$  i  $I_2$  uzeta tačka  $(0.61 \cdot 10^{10} \text{ m}^{-1}, 3.30 \text{ meV})$ , koja značajno odstupa od krive  $E(k) = S (I_1 + I_2) a^2 k^2$ , i time karakteriše pravac  $\langle 100 \rangle$ .

<sup>6</sup> $\cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2}$

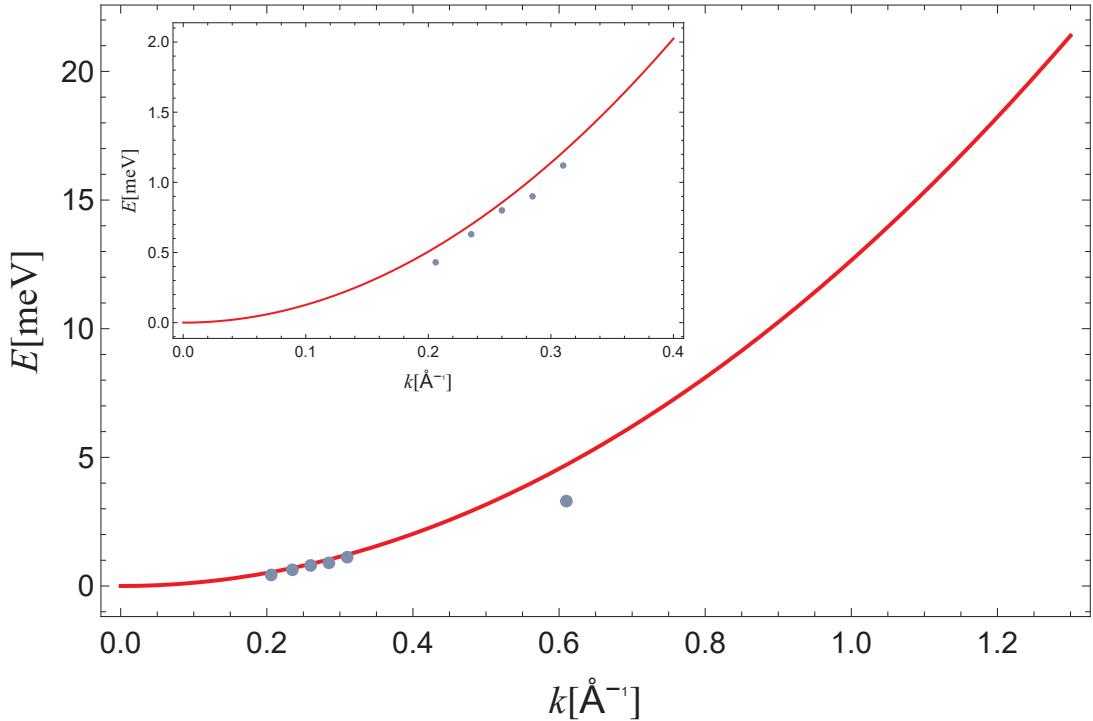
<sup>7</sup>Na osnovu (3.16) efektivnu masu ekscitacijia (videti [1]) možemo dobiti kao

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2S(I_1 + I_2)a^2}, \quad (3.14)$$

što za naše vrednosti parametara daje

$$m^* = 2.75 \cdot 10^{-28} \text{ kg}. \quad (3.15)$$

Ova vrednost je za dva reda veličine veća od mase elektrona. Kako u Blohovoj aproksimaciji zanemarujuemo interakciju magnona, izračunata efektivna masa magnona je i masa magnona.



Sl. 9: Crvena kriva ilustruje zavisnost  $E(k) = S(I_1 + I_2) a^2 k^2$ , a plave tačke su eksperimentalne tačke sa pravca  $\langle 100 \rangle$  sa Sl.2. Inset pokazuje isti grafik, ali na manjem opsegu intenziteta talasnog vektora.

U ovom poglavlju je pokazano da je opravdano koristiti integrale izmene  $I_1 = 0.0993772$  meV i  $I_2 = 0.036969$  meV za opisivanje interakcije između prvih i drugih suseda u EuO. Vrednosti integrala izmene u kelvinima su  $\mathcal{I}_1 = \frac{I_1}{k_B} = 1.1522$  K,  $\mathcal{I}_2 = \frac{I_2}{k_B} = 0.428626$  K. Vrednosti integrala izmene dobijene u ovom radu odstupaju od vrednosti iz [12], gde je dobijeno  $\mathcal{I}_{1P} = (1.212 \pm 0.016)$  K i  $\mathcal{I}_{2P} = (0.238 \pm 0.030)$  K.

U narednom poglavlju biće izračunata relativna magnetizacija u Blohovoj aproksimaciji za vrednosti integrala izmene dobijenih u ovom poglavlju.

# Glava 4

## Relativna magnetizacija u Blohovoj aproksimaciji u funkciji temperature

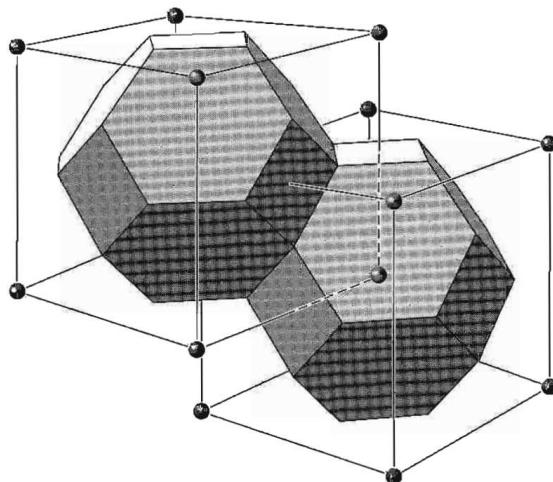
U poglavlju 2.2 dat je izraz za relativnu magnetizaciju u Blohovoj aproksimaciji:

$$\sigma = 1 - \frac{1}{NS} \sum_{\mathbf{k}} \left[ e^{\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T}} - 1 \right]^{-1}, \quad (4.1)$$

i dato je da se, u cilju dobijanja numeričkih vrednosti, prelazi sa sume na integral, prema pravilu

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) \longrightarrow \frac{V_{\text{el}}}{(2\pi)^3} \int F(\mathbf{k}) d^3 k, \quad (4.2)$$

gde je  $V_{\text{el}}$  zapremina elementarne celije direktnе rešetke, dok se integracija vrši po I Briluenovoj zoni. Iako primena ovog pravila deluje prilično direktno, otežavajuće okolnosti se javljaju jer određivanje granica integracije u (4.2), u slučaju različitih rešetki, može biti složen geometrijski problem. Takav je slučaj i sa površinski centriranom rešetkom EuO, kojoj je recipročna rešetka zapreminske centrirane.



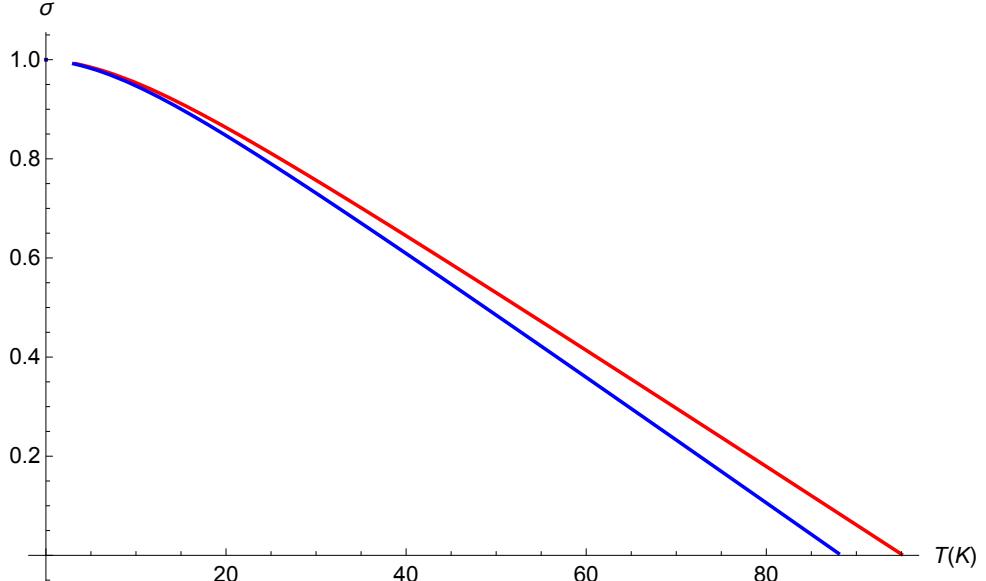
Sl. 10: Briluenove zone površinski centrirane kubne rešetke. Recipročna rešetka je zapreminske centrirana. Slika je preuzeta iz [19].

Ovaj problem se može zaobići zahvaljujući periodičnosti funkcije  $E(\mathbf{k})$ . Bitno je samo da se integracija ne vrši po manjoj oblasti od I Briluenove zone, dok će rezultat integracije biti validan ako se ona izvrši po nekoj većoj oblasti  $\mathbf{k}$  prostora, koja u sebi sadrži I Briluenovu zonu. Drugim rečima, umesto primitivne koristimo elementarnu ćeliju [20]. U slučaju antiferomagnetička, ovo pojednostavljenje je korišćeno u [21]. Na osnovu [21], relativna magnetizacija u Blohovoj aproksimaciji, za slučaj EuO, može biti računata kao:

$$\sigma(T) = 1 - \frac{1}{S} \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_x dk_y dk_z [e^{\frac{E(\mathbf{k})}{k_B T}} - 1]^{-1}, \quad (4.3)$$

gde je

$$\begin{aligned} E(\mathbf{k}) &= 42I_1 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right] \right\} \\ &+ 21I_2 \left\{ 1 - \frac{1}{3} \left[ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.4)$$



Sl. 11: Crvena kriva predstavlja zavisnost relativne magnetizacije od temperature u Blohovoj aproksimaciji, za vrednosti integrala izmene dobijenih iz fitovanja u ovom radu  $I_1 = \frac{I_1}{k_B} = 1.1522$  K,  $I_2 = \frac{I_2}{k_B} = 0.428626$  K. Plava kriva je zavisnost relativne magnetizacije od temperature u Blohovoj aproksimaciji, za vrednosti integrala izmene  $I_{1P} = 1.212$  K i  $I_{2P} = 0.238$  K, dobijenih iz rada [12].

Odgovarajuće kritične temperature su, respektivno,  $T_C = 94.88$  K i  $T_{CP} = 87.73$  K.

Temperatura faznog prelaza feromagnet-paramagnet, tzv. Kirijeva temperatura  $T_C$ , definisana je jednačinom  $\sigma(T_C) = 0$ . Eksperimentalna vrednost za Kirijevu temperaturu EuO je  $T_C = (69.15 \pm 0.05)$  K [12]. Blohova aproksimacija ne daje dobru procenu Kirijeve temperature, jer sa porastom temperature, interakcije magnona (spinskih talasa) imaju sve veći uticaj, a Blohova aproksimacija zanemaruje ove interakcije. Iz ovog razloga, Kirijeva temperatura dobijena u Blohovoj aproksimaciji biće viša od eksperimentalno dobijene kritične temperature, jer magnon-magnon interakcije razuređuju sistem [1]. Ovo se vidi i sa Sl.11, jer je Kirijeva temperatura u Blohovoj aproksimaciji, koja je dobijena u ovom radu,  $T_C \approx 95$  K.

# Zaključak

U ovom radu, za ispitivanje magnetnih karakteristika halkogenida europijuma EuO, korišćen je hamiltonian Hajzenbergovog feromagneta u Blohovoj aproksimaciji. Na osnovu eksperimentalnih vrednosti disperzije za EuO na temperaturi 5.5K, pokazano je da, polazeći od Blohovog hamiltonijana koji uključuje samo interakciju među najbližim susedima, nije moguće reprodukovati eksperimentalnu disperziju duž različitih pravaca u Briluenovoj zoni. Stoga je u hamiltonian uključena i interakcija sledećih (drugih) najbližih suseda. Iz eksperimentalne disperzije određeni su integrali izmene između najbližih i sledećih najbližih suseda koji figurišu u hamiltonijanu. U radu su, takođe, dati analitički izrazi za disperziju i magnetizaciju u funkciji temperature, u Blohovoj aproksimaciji. Kod određivanja Kirijeve temperature pokazano je, još jednom, da je Blohova aproksimacija loša, jer daje vrednost Kirijeve temperature veću od eksperimentalno dobijene. Ovaj rezultat je očekivan, jer sa povećanjem temperature magnon-magnon interakcije postaju sve značajnije, a one se zanemaruju u okviru Blohove aproksimacije.

Dakle, da bi se preciznije odredila kritična temperatura, moraju se uzeti u obzir i magnon-magnon interakcije. Jedan od načina da se to postigne je upotreba teorije perturbacija date u [22, 23]. Prednost korišćenja ovakve teorije perturbacija je ta što bi se u računanju popravki koristili integrali izmene koji su određeni u ovom radu. Primena nekih drugih metoda, poput Kalenovog metoda, zahtevala bi ponovno određivanje integrala izmene i izraz za magnetizaciju bi bio dat u samousaglašenoj formi.

Uključivanje magnon-magnon interakcija nije deo ovog rada i biće ostavljeno za dalje istraživanje.

# Dodatak A

## Dobijanje izraza za disperziju u Blohovoj aproksimaciji za interakciju među najbližim susedima

Hamiltonian

$$\hat{H} = \hat{H}_0 - SI \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} + SIz \sum_n \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_n \quad (\text{A.1})$$

se može dijagonalizovati primenom diskretnе Furije transformacije:

$$\hat{B}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}, \quad \hat{B}_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}}, \quad (\text{A.2})$$

gde je  $N$  broj čvorova rešetke, a  $z$  broj prvih suseda. Furije transformaciji podleže svaki član (sabirak) hamiltonijana, ponaosob. Član  $\hat{H}_0$  ne sadrži bozonske operatore, te samim tim, njegova Furije transformacija ne ulazi u izraz za disperziju. Za članove koji sadrže dva bozonska operatora, važi:

$$\begin{aligned} \sum_{n,\lambda} \hat{B}_n^\dagger \hat{B}_{n+\lambda} &= \sum_{n,\lambda} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot(\mathbf{n}+\lambda)} \\ &= \sum_{n,\lambda} \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{q}} e^{-i\mathbf{k}\cdot\mathbf{n}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}} e^{i\mathbf{q}\cdot\lambda} \\ &= \sum_{\mathbf{k},\mathbf{q},\lambda} \frac{1}{N} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{q}} e^{i\mathbf{q}\cdot\mathbf{n}} \underbrace{\sum_{\mathbf{n}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k})\cdot\mathbf{n}}}_{N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}} \\ &= \sum_{\mathbf{k},\lambda} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k}\cdot\lambda} \\ &= \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}} \underbrace{\sum_{\lambda} e^{i\mathbf{k}\cdot\lambda}}_{z\gamma(\mathbf{k})} \\ &= z \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}}, \end{aligned} \quad (\text{A.3})$$

$$\begin{aligned}
\sum_{\mathbf{n}} \hat{B}_{\mathbf{n}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{n}} &= \sum_{\mathbf{n}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} e^{-i \mathbf{k} \cdot \mathbf{n}} \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\mathbf{q}} \hat{B}_{\mathbf{q}} e^{i \mathbf{q} \cdot \mathbf{n}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}, \mathbf{q}} \frac{1}{N} \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{q}} \underbrace{\sum_{\mathbf{n}} e^{i(\mathbf{q}-\mathbf{k}) \cdot \mathbf{n}}}_{N \delta_{\mathbf{k}, \mathbf{q}}} \\
&= \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{k}}.
\end{aligned} \tag{A.4}$$

Dakle, hamiltonijan (A.1) u  $\mathbf{k}$ -prostoru ima oblik

$$\begin{aligned}
\hat{\mathbb{H}} &= \hat{\mathbb{H}}_0 - S I z \sum_{\mathbf{k}} \gamma(\mathbf{k}) \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{k}} + S I z \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{k}} \\
&= \hat{\mathbb{H}}_0 + \sum_{\mathbf{k}} \underbrace{S I z (1 - \gamma(\mathbf{k}))}_{E(\mathbf{k})} \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{k}},
\end{aligned} \tag{A.5}$$

gde je  $E(\mathbf{k})$  tražena disperzija.

## Dodatak B

### Površinski centrirana kubna rešetka

Posmatra se površinski centrirana kubna rešetka čija je elementarna celija parametra  $a$ . Svaki atom ovako definisane rešetke ima  $z = 12$  prvih suseda. Koordinate proizvoljno odabranog atoma i njegovih prvih suseda su, respektivno,  $\mathbf{n}_0 = (0, 0, 0)$  i:

$$\begin{aligned}\mathbf{n}_1 &= \left(0, \frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right), & \mathbf{n}_2 &= \left(0, -\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}\right), & \mathbf{n}_3 &= \left(0, -\frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right), & \mathbf{n}_4 &= \left(0, \frac{a}{2}, \frac{a}{2}\right); \\ \mathbf{n}_5 &= \left(\frac{a}{2}, 0, -\frac{a}{2}\right), & \mathbf{n}_6 &= \left(-\frac{a}{2}, 0, -\frac{a}{2}\right), & \mathbf{n}_7 &= \left(-\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right), & \mathbf{n}_8 &= \left(\frac{a}{2}, 0, \frac{a}{2}\right); \\ \mathbf{n}_9 &= \left(\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, 0\right), & \mathbf{n}_{10} &= \left(-\frac{a}{2}, -\frac{a}{2}, 0\right), & \mathbf{n}_{11} &= \left(-\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right), & \mathbf{n}_{12} &= \left(\frac{a}{2}, \frac{a}{2}, 0\right).\end{aligned}$$

Nesimetrična Furije transformacija integrala izmene  $I$  između najbližih suseda je

$$J(\mathbf{k}) = I \sum_{\lambda} e^{-i\mathbf{k}\cdot\lambda}, \quad (\text{B.1})$$

što u slučaju površinski centrirane kubne rešetke iznosi

$$J(\mathbf{k}) = 4I \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right]. \quad (\text{B.2})$$

Geometrijski faktor, u ovom slučaju, jednak je

$$\gamma(\mathbf{k}) = \frac{1}{zI} J(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} \left[ \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_x a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) + \cos\left(\frac{k_y a}{2}\right) \cos\left(\frac{k_z a}{2}\right) \right]. \quad (\text{B.3})$$

Ukoliko se sada posmatra taj isti, proizvoljno odabrani atom, koordinate njegovih drugih suseda su:

$$\begin{aligned}\mathbf{n}_1 &= (a, 0, 0), & \mathbf{n}_2 &= (0, a, 0), & \mathbf{n}_3 &= (0, 0, a), \\ \mathbf{n}_4 &= (-a, 0, 0), & \mathbf{n}_5 &= (0, -a, 0), & \mathbf{n}_6 &= (0, 0, -a).\end{aligned} \quad (\text{B.4})$$

Nesimetrična Furije transformacija integrala izmene  $I_2$  između drugih suseda je

$$\tilde{J}(\mathbf{k}) = I_2 \sum_{\delta} e^{-i\mathbf{k}\cdot\delta}, \quad (\text{B.5})$$

i nakon raspisivanja dobija formu

$$\tilde{J}(\mathbf{k}) = 2I_2 \left[ \cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a) \right]. \quad (\text{B.6})$$

Odgovarajući geometrijski faktor je

$$\tilde{\gamma}(\mathbf{k}) = \frac{1}{z_2 I_2} \tilde{J}(\mathbf{k}) = \frac{1}{3} [\cos(k_x a) + \cos(k_y a) + \cos(k_z a)], \quad (\text{B.7})$$

i on je identičan geometrijskom faktoru za prve susede proste kubne rešetke.

# Bibliografija

- [1] B. S. Tošić, *Statistička fizika*, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad (1978).
- [2] Grupa autora, *Jubilej Zvonka Marića*, SFIN, V (2) 1-135, Beograd (1992).
- [3] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2009).
- [4] M. Pavkov-Hrvojević, M. Škrinjar, D. Kapor, P. Krstonošić, *Zbirka zadataka po odabranim poglavljima statističke fizike*, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad (2007).
- [5] P. Mali, *Primena samousaglašene aproksimacije u analizi slojevitih antiferomagnetika*, diplomski rad, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad (2011).
- [6] S. Radošević, P. Mali, *Zbirka zadataka iz matematičke fizike*, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad (2017).
- [7] I. Milošević, *Vektorski prostori i elementi vektorske analize*, Univerzitet u Beogradu, Beograd (1997).
- [8] S. Radošević, *Magnetne osobine antiferomagnetičnih halogenida mangana*, master rad, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad (2009).
- [9] M. Berović, *Ispitivanje uticaja frustracije i ciklične interakcije na Hajzenbergov antiferomagnet tipa  $La_2CuO_4$  u okviru samousaglašene teorije spinskih talasa*, master rad, Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad (2014).
- [10] V. G. Baryakhtar, V. N. Krivoruchko, D. A. Yablonskii, Teoreticheskaya i Matematicheskaya Fizika **53**, 156 (1982), [Theoretical and Mathematical Physics **53**, 1047 (1982)].
- [11] F. Bloch, Z. Physik **61**, 206 (1930).
- [12] L. Passell, O. W. Dietrich, J. Als-Nielsen, Physical Review B **14**, 11, 4897 (1976).
- [13] M. Takahashi et al, Physical Review Letters **67**, 6, 746 (1991).
- [14] K. Hirakawa, H. Ikeda, Journal of the Physical Society of Japan **35**, 1328 (1973).
- [15] C. P. Landee, R. D. Willett, Physical Review Letters **43**, 463 (1979).
- [16] R. D. Willett, C. P. Landee, R. M. Gaura, D. D. Swank, H. A. Groenendijk, A. J. Van Duyneveldt, Journal of Magnetism and Magnetic Materials **15-18**, 1055 (1980).

- [17] J. Als-Nielsen, O. W. Dietrich, L. Passell, Physical Review B **14**, 11, 4908 (1976).
- [18] N. J. C. Ingle, I. S. Elfimov, Physical Review B **77**, 12, 121202 (2008).
- [19] C. Kittel, *Introduction to Solid State Physics*, Wiley, New York (1976).
- [20] N.W. Ashcroft, D. Mermin. *Solid state physics*, Saunders College, Philadelphia, (1976).
- [21] R. Kubo, Physical Review, **87** 568 (1952).
- [22] S. Radošević, M. Pantić, M. Pavkov-Hrvojević, D. Kapor, Annals of Physics **339**, 382-411. (2013).
- [23] S. Radošević, Annals of Physics **362**, 336-362 (2015).

**UNIVERZITET U NOVOM SADU  
PRIRODNO - MATEMATIČKI FAKULTET  
KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA**

*Redni broj:*

**RBR**

*Identifikacioni broj:*

**IBR**

*Tip dokumentacije:* Monografska dokumentacija

**TD**

*Tip zapisa:* Tekstualni štampani materijal

**TZ**

*Vrsta rada:* Diplomski rad

**VR**

*Autor:* Andjela Šakota

**AU**

*Mentor:* prof. dr Slobodan Radošević

**MN**

*Naslov rada:* Primena Hajzenbergovog modela u analizi magnetnih karakteristika halkogenida europijuma EuO

**NR**

*Jezik publikacije:* Srpski (Latinica)

**JP**

*Jezik izvoda:* Srpski/Engleski

**JI**

*Zemlja publikovanja:* Republika Srbija

**ZP**

*Uže geografsko područje:* Vojvodina

**UGP**

*Godina:* 2018.

**GO**

*Izdavač:* Autorski reprint

**IZ**

*Mesto i adresa:* Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

**MA**

*Fizički opis rada:* 4 poglavlja/30 strana/23 reference/11 slika

**FO**

*Naučna oblast:* Fizika

**NO**

*Naučna disciplina:* Teorijska fizika kondenzovane materije

**ND**

*Predmetna odrednica/ ključne reči:* Hajzenbergov feromagnet, magnetni izolator, Kirijeva temperatura

**PO**

**UDK**

*Čuva se:* Biblioteka Departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu

**ČU**

*Važna napomena:* Nema

**VN**

*Izvod:* Feromagnetni izolator EuO je proučavan polazeći od hamiltonijana Hajzenbergovog feromagneta u Blohovoj aproksimaciji. Integrali izmene su određeni iz eksperimentalne magnonske disperzije, i ovako određeni integrali izmene su iskorišćeni za dobijanje relativne magnetizacije u funkciji temperature i procenu Kirijeve temperature.

**IZ**

*Datum prihvatanja teme od NN veća:* Oktobar, 2018.

**DP**

*Datum odrbrane:* 23.10.2018.

**DO**

*Članovi komisije:*

**KO**

*Predsednik:* dr Milan Pantić, redovni profesor

*član:* dr Slobodan Radošević, vanredni profesor

*član:* dr Goran Šrbac, docent

**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:* Andjela Šakota

**AU**

*Mentor:* Dr. Slobodan Radošević

**MN**

*Title:* Magnetic properties of EuO: an application of the Heisenberg model

**TI**

*Language of text:* Serbian (Latin)

**LT**

*Language of abstract:* Serbian/English

**LA**

*Country of publication:* Serbia

**CP**

*Locality of publication:* Vojvodina

**LP**

*Publication year:* 2018.

**PY**

*Publisher:* Author's reprint

**PU**

*Publication place:* Faculty of Science and Mathematics, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

**PP**

*Physical description:* 4 chapters/30 pages/23 references/11 figures

**PD**

*Scientific field:* Physics

**SF**

*Scientific discipline:* Theoretical condensed matter physics

**SD**

*Subject/Key words:* Heisenberg ferromagnet, magnetic insulator, Curie temperature

**SKW**

**UDK**

*Holding data:* Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

**HD**

*Note:* None

**N**

*Abstract:* Ferromagnetic insulator EuO is studied starting from Hamiltonian of Heisenberg ferromagnet in Bloch approximation. Exchange integrals are extracted from magnon dispersion experimental data, and they are used for obtaining relative magnetization in function of temperature and estimation of Curie temperature.

**AB**

*Accepted by the Scientific Board:* October, 2018.

**ASB**

*Defended on:* 23.10.2018.

**DO**

*Thesis defend board:*

**DB**

*President:* Dr. Milan Pantić, Full professor

*Member:* Dr. Slobodan Radošević, Associate professor

*Member:* Dr. Goran Štrbac, Assistant professor