

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

Природно-математички факултет
Радна заједница заједничких послова
НОВИ САД

Пријемљено:	24	V	1978
Орг. јед.	Број	Прилог	Вредност
од	495/1		

BORISLAV M. NIKIN

NUMERIČKA ANALIZA
NEKIH FUNDAMENTALNIH PROBLEMA
TEORIJE MAGNETIZMA

DOKTORSKA DISERTACIJA

ZRENJANIN

1978

Srdačno se zahvaljujem profesoru Dr. Bratislavu S. Tošiću, mentoru ovoga rada, na nesebičnoj pomoći koju mi je pružio tokom izrade disertacije. Takođe se zahvaljujem Dr. Marku M. Marinkoviću, naučnom saradniku IBK-Vinča i Mr. Gordani Knežević, asistentu PMF Sarajevo, na naučnoj saradnji.

Dugujem zahvalnost SIZ-u za naučno-istraživački rad SAP Vojvodine koji mi je svojim finansijskim učešćem omogućio korišćenje veoma skupih računskih mašina bez kojih se rad na izračunavanju numeričkih podataka uopšte ne bi mogao ni zamisliti.

Borislav Nikin

S A D R Č A J

UVOD

I G L A V A

OSNOVNI POJMOVI KVANTNE TEORIJE MAGNETIZMA

1. Sile izmene i dipol-dipol sile u magneticima
2. Hajzenbergov i Izingov model
3. Pokušaji usavršavanja Hajzenbergovog modela
4. Feromagnetični i antiferomagnetični

II G L A V A

MAGNETIZACIJA FEROMAGNETIKA I KRITIČNA TEMPERATURA

1. Dajsonov razvoj za magnetizaciju na niskim temperaturama
2. Metod haotičnih faza i metod molekularnog polja
3. Bozonska polja u analizi kritične temperature
4. Usavršeni metod haotičnih faza

III G L A V A

IZMENSKI I DIPOLNI MAGNETIZAM

1. O dipolnom magnetizmu
2. Stabilizacija sistema
3. Analiza sistema na niskim temperaturama
4. Uticaj dipolnih sila na veličinu kritične temperature i multičestični procesi

IV G L A V A

UTICAJ FONONA NA KINEMATIČKE NIVOE U FEROMAGNETIKU

1. Jednačina za Grinovu funkciju u prisustvu fononskog polja
2. Uslovi koji definišu kinematičke nivoe
3. Energija kinematičkog nivoa

V G L A V A

PROBLEMI ANALIZE HAJZENBERGOVOG ANTIFEROMAGNETIKA

1. Hamiltonijan izotropnog antiferomagnetika
2. Unitarna transformacija antiferomagnetcnog hamiltonijana

- i korigovana energija osnovnog stanja
3. Harmonijski zakoni disperzije i magnetizacija na niskim
temperaturama
4. Aproksimacija haotičnih faza za antiferomagnetik

ZAKLJUČAK

DODATAK

SPISAK LITERATURE

U V O D

Disertacija je posvećena nekim problemima kvantne teorije magnetizma koji su do danas nedovoljno razjašnjeni ili nedovoljno korektno tretirani. Jedan od tih problema je pitanje pravilnog izbora talasne funkcije osnovnog stanja. Ako se izuzme izotropni Hajzenbergov model za feromagnetik, problem pravilnog izbora osnovnog stanja pojavljuje se kod antiferomagnetika, kod ferimagnetika i kod feromagnetika sa dipolnim i izmenskim interakcijama. U nekim slučajevima zbog nepravilnog izbora osnovnog stanja hamiltonijan sadrži linearne članove po operatorima koji kreiraju ili anihiliraju elementarne ekscitacije. Ovakav slučaj može se egzaktno rešiti eliminacijom ovih linearnih članova pomoću unitarne transformacije jednočestičnih stanja. Ovakav problem u disertaciji je rešavan za feromagnet sa dipolnim i izmenskim interakcijama, pri čemu je numerički račun (rešavanja uslova eliminacije) sведен na sistem od dve algebarske jednačine osmog stepena sa dve promenljive.

Mnogo ozbiljniji problem predstavlja eliminacija onih delova hamiltonijana koji sadrže par kreacionih odnosno par anihilacionih operatora. Zbog prisustva ovakvih članova, koji su takođe posledica nedovoljno dobro definisanog osnovnog stanja, operator totalnog broja kvazičestica ne komutira sa hamiltonijanom sistema pa se često ovaj problem naziva problemom neodržanja. Rešavanje ovog problema metodom U-V transformacija Bogoliubova ne može se prihvati kao korektno, jer zbog specifičnih komutacionih relacija koje važe za spinske operatore u ovakvim slučajevima imamo doprinose i od članova hamiltonijana koji su reda višeg od kvadratnog. Ovom problemu posvećen je niz radova [1 - 5] ali svi se oni odnose na optičke probleme gde se može naći dobar mali parametar eliminacije koji predstavlja odnos širine zone i energije pobudjenja izolovanog molekula. U kvantnoj teoriji magnetizma, konkretno kod antiferomagnetika, sličan parametar je blizak jedinici pa je to zahtevalo upotrebu nekoliko prvih članova Vajlovog identiteta uz odgovarajuće numeričke račune. Tako je dobijena energija osnovnog stanja antiferomagnetika sa tačnošću koja se relativno, u odnosu na druge radove, može oceniti kao zadovoljavajuća.

Druga grupa problema koja je rešavana u okviru izrade ove disertacije je ponašanje feromagnetika u okolini kritične temperature. U tom slučaju korišćen je metod koji je nazvan usavršeni metod haotičnih faza jer formalno podseća na metod haotičnih faza Tjablikova [6]. Razlika se sastoji u tome što se u ovom metodu prilikom određivanja temperaturskog ponašanja magnetizacije koristi tačan zakon disperzije za magnone. Zamena približnog (Tjablikovskog) zakona disperzije tačnim, dovodi do matematičkih komplikacija koje se mogu rešiti samo upotrebljom računara. Konkretno, radi se o rešavanju jedne nelinearne integralne jednačine Hamerštajnovog tipa. Ona je rešena numerički i dobijeni su rezultati koji ukazuju da Hajzenbergov feromagnet sadrži u sebi takvu dinamiku koja dopušta više temperatura prelaza. U svim do sada poznatim prilazima ovom problemu, najverovatnije zbog suviše grubih aproksimacija, teorija je davala samo jednu temperaturu prelaza i to je uvek bio fazni prelaz druge vrste. Ovakvi rezultati mogli su da budu relativno dobri za prelazne metale (Fe, Co, Ni) ali nisu mogli da objasne ponašanje lantanidskih feromagnetika. Zanimljivo je napomenuti da su u nedavno objavljenim radovima [7, 8] dobijeni rezultati slični ovima koje daje usavršeni metod haotičnih faza ali da su pri tome korišćene druge ideje (pojava dopunskih ekscitacija u sistemu).

Osim dva fundamentalna problema koji su gore navedeni u disertaciji su obradjeni i neki drugi problemi koji su vezani za interakciju spinskih talasa sa fononima. Interakcija magnona i fonona do danas je u literaturi detaljno analizirana. Naročito je posvećena pažnja uticaju mehaničkih oscilacija na ponašanje magnetizacije pri čemu su analize vršene i za niske i za visoke temperature [9 - 22]. Zbog toga ovi problemi nisu analizirani u disertaciji. Međutim, u već pomenutim radovima [7, 8] pokazano je da značajnu ulogu u magneticima mogu da igraju dopunski energetski nivoi (kinematičke ekscitacije), pa je zato u disertaciji dosta pažnje posvećeno problemu uticaja mehaničkih oscilacija na egzistenciju i ponašanje ovih dopunskih nivoa.

I G L A V A

OSNOVNI POJMOVI KVANTNE TEORIJE MAGNETIZMA

1. Sile izmene i dipol-dipol sile u magneticima

Klasična podela magnetnih materijala na različite tipove bazira na pojmu magnetne susceptibilnosti χ koja predstavlja koeficijent proporcionalnosti izmedju magnetnog momenta M materijala i spoljašnjeg magnetnog polja H u kome se magnetik nalazi. Pošto se magnetni momenti uvek orijentišu duž spoljašnjeg polja, veza izmedju magnetnog momenta spoljašnjeg polja i magnetnog momenta materijala može se napisati u skalarnom obliku na sledeći način:

$$M = \chi H$$

Ako je χ negativna veličina, onda se takav materijal naziva dijamagneti ili prosto dijamagnetikom. Ako je χ pozitivna veličina, onda razlikujemo dva slučaja:

- a) χ pozitivno i malo - tada je materijal paramagneten
- b) χ pozitivno i veliko - tada je materijal feromagneten

Ova fenomenološka podela magnetnih materijala je dosta gruba ali ipak dobra da magnetike razvrsta u tri osnovne klase. Finiju podelu možemo praviti samo na osnovu mikroskopskih karakteristika magnetnih materijala. Pošto će cilj rada biti ispitivanje feromagnetnih materijala, mi ćemo ovu finiju podelu izvršiti samo za ovu klasu magnetika. Međutim, pre nego što predjemo na klasifikaciju feromagnetika, moramo pre svega razjasniti koji su atomski fenomeni odgovorni za pojavu magnetizma uopšte.

Prva ideja za mikroskopsko objašnjenje magnetnih fenomena bila je VEBER-ova ideja o magnetiku kao sistemu uredjenih elementarnih magneta. Ova ideja ima taj nedostatak što priroda ovih elementarnih magneta nije objašnjena, a još manje je rečeno o prirodi sila izmedju njih. Ono što je dobro i što je i danas osnovna teorija magnetizma je to da se magnetik rasmatra kao sistem uredjenih objekata koji se povišenjem temperature ili nekim spoljnjim mehaničkim dejstvom može "razurediti", tj. feromagneti i pojave u njima danas se rasmatraju u granicama opštih order-disorder teorija.

Savremena mikroteorija magnetizma, prihvatajući Veberovu ideju o sistemu uredjenih elemenata sa magnetnim svojstvima, imala je zadatak da utvrdi koji su ti uredjeni elementi i ka-

kva je priroda sila koje izmedju njih deluju. Odgovor na prvo pitanje pronadjen je relativno lako na osnovu eksperimenata i poznavanja strukture omotača atoma feromagnetičnih materijala i konstantovano da su elementi odgovorni za magnetne fenomene, spinovi elektrona nepotpunjenih 3d ljudski za jake magnetike (F_e, C_o, N_i) i spinovi nepotpunjenih 4f ljudski za slabe feromagnete (retke zemlje). Odgovor na drugo pitanje pronadjen je nešto teže. U početku se mislilo da je magnetizam posledica dipol-dipolnih interakcija izmedju magnetnih momenata elektro- na nepotpunjenih ljudski, ali se ispostavilo da je konstanta ovih interakcija reda veličine $10 K_B$ (K_B -BOLCMANOVA konstanta) i zbog toga ova ideja nije mogla da se održi, jer eksperiment pokazuje da su tačke prelaza u feromagneticima reda veličine $1000 K_B$. Pošto je tačka prelaza, grubo govoreći, reda veličine konstante interakcije izmedju atoma očigledno je da, ako bi ideja o di- pol-dipolnim interakcijama bila dobra, onda ne bismo imali ni jedan feromagnetik sa tačkom prelaza višom od $10-20^{\circ}K$. Druga ideja izgledala je u neku ruku paradoksalna i zasnivala se na mišljenju da su za magnetne fenomene odgovorne električne sile izmedju elektrona. Kao što je poznato u kvantno-mehaničkoj interpretaciji elektroni se medjusobno ne razlikuju, a talasna funkcija za sistem od dva elektrona mora biti antisimetrična kombinacija talasnih funkcija svakog od ovih elektrona da bi bio zadovoljen PAULIJEV princip isključenja. Ako energiju interakcije izmedju dva elektrona usrednjimo po antisimetričnim funkcijama, onda se u ovoj srednjoj energiji pojavljuje jedan dopunski član koji se klasično uopšte ne može objasniti i taj se dopunski član naziva energija izmene. Ocenjivanje reda ve- ličine energije izmene pokazalo je da ona za par elektrona iz- nosi $1000 K_B$ i ovo je konačno rešilo dilemu o prirodi sila in- terakcije u magnetizmu, tj. konačno se zna da su sile interak- cije u magnetizmu sile izmene izmedju elektrona, tj. da su one čisto kvantomehaničkog porekla. Otuda je savremeno gledanje na magnetne fenomene sledeće: pod feromagneton podrazumevamo sistem uređenih spinova koji izmedju sebe daluju silama izme- ne.

Na osnovu ovoga izvršena je finija klasifikacija feroma- gnetnih materijala.

Ako magnetni kristal ima prostu rešetku sastavljenu od

spinova iste veličine S , onda se takav kristal naziva feromagnetik.

Ako je magnetni kristal sastavljen od dve podrešetke pri čemu obe imaju spinove iste veličine ali antiparalelne, onda je takav kristal antiferomagnetik.

Magnetni kristali sa više podrešetki od kojih je svaka sastavljena od različitih spinova, nazivaju se ferimagneticici.

Posebnu klasu feromagnetika čine kristali sa više podrešetki koji imaju različite spinove ali su svi spinovi u svim podrešatkama međusobno paralelni. Ponekad se oni u literaturi nazivaju feromagneticima sa n podrešetki.

Operator spina je vektorski operator i može se napisati kao suma vektora duž komponenata pravouglog koordinatnog sistema tj.:

$$\vec{S} = S^x \hat{i} + S^y \hat{j} + S^z \hat{k} \quad (\text{I.1.1})$$

ovde su \hat{i} , \hat{j} , \hat{k} , ortovi pravouglog sistema, a S^x , S^y i S^z - komponente spina. Najlakš je zapamtiti komutacione relacije za spinske operatore po analogiji sa vektorskima produktima ortova osa tj. na osnovu

$$\hat{i} \times \hat{j} = \hat{k} \quad ; \quad \hat{j} \times \hat{k} = \hat{i} \quad ; \quad \hat{k} \times \hat{i} = \hat{j} \quad (\text{I.1.2})$$

Mi po analogiji možemo pisati

$$[S^x, S^y] = iS^z \quad ; \quad [S^y, S^z] = iS^x \quad ; \quad [S^z, S^x] = iS^y \quad (\text{I.1.3})$$

Treba odmah napomenuti da su komutacione relacije (I.1.3) opšte komutacione relacije za komponente momenta u kvantnoj mehanici ispisane u sistemu jedinica $n = c = 1$.

Dalje transformisanje komutacionih relacija za spinske operatore vršićemo u punoj analogiji sa komutacionim relacijama za orbitalni moment elektrona. Kao što je poznato iz teorije orbitalnog momenta ako Z osu odaberemo za osu kvantizacije, onda operatori

$$L^+ = L^x + iL^y \quad i \quad L^- = L^x - iL^y$$

delujući u sistemu svojstvenih funkcija operatora L^z povećavaju odnosno smanjuju L^z projekciju za jedinicu i to tako što je operator L^+ povećava, a L^- smanjuje.

Ako magnet shvatimo kao sistem uredjenih spinova i to tako da u osnovnom stanju z projekcija svih spinova ima maksimalnu vrednost S (S je intenzitet spina), a pobudjenja magnetnog sistema shvatimo kao narušavanje ovoga reda u osnovnom stanju tj. kao menjanje vrednosti z projekcije spina, onda je jasno da uvodjenjem operatora

$$S^+ = S^x + iS^y \quad \text{and} \quad S^- = S^x - iS^y$$

ima fizičkog smisla jer su upravo oni odgovorni za menjanje veličine z projekcije. Zbog toga ćemo ovde navesti komutacione relacije za operatore S^+ i S^- .

$$S^+ S^- = (S^x + iS^y)(S^x - iS^y) = (S^x)^2 + (S^y)^2 - i[S^x, S^y]$$

$$S^- S^+ = (S^x - iS^y)(S^x + iS^y) = (S^x)^2 + (S^y)^2 + i[S^x, S^y]$$

Ako ove dve relacije oduzmemo i za komutator $[S^x, S^y]$ zamenimo njegovu vrednost iz (I.1.3) dobijemo

$$[S^x, S^y] = 2S^z \quad (\text{I.1.4})$$

Ako gornju jednačinu saberemo i za komutator $[S^x, S^z]$ zamenimo njegovu vrednost iz (I.1.3) dobijemo

$$[S^x, S^z] = 2(S^x)^2 + 2(S^z)^2 = 2[(S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2] - 2(S^z)^2$$

tj.

$$[S^x, S^z] = 2S(S+1) - 2(S^z)^2 \quad (\text{I.1.5})$$

Pri dobijanju rezultata (I.1.5) korišćena je činjenica da su svojstvene vrednosti kvadrata operatora S date kao $S(S+1)$ što je u punoj analogiji sa teorijom orbitalnog momenta.

Do sada dobijene formule u kojima su date komutacione relacije za spinske operatore definišu tzv. kinematiku spinskih sistema. Pošto je magnet sistem uredjenih spinova ali na raznim čvorovima kristalne rešetke, neophodno je spinske operatore snabdeti sa još jednim indeksom koji označava čvor rešetke u kome se nalazi atom. Spinski operatori za razne čvorove deluju svaki u svom prostoru talasnih funkcija i очigledno je da zbog toga za različite čvorove oni moraju da komutiraju. Zbog toga ako sa \bar{n} i \bar{m} obeležimo dva različita čvora rešetke i sa \bar{S}_n i \bar{S}_m spinove u tim čvorovima, onda relaciju (I.1.4) možemo generalisati na sledeći način:

$$[S_{\bar{n}}^+, S_{\bar{m}}^-] = 2S_{\bar{n}}^z \delta_{\bar{n}\bar{m}}$$

(I.1.6)

Pošto smo ovde rešili problem kinematike spinskih opera-tora, postavlja se pitanje kakav oblik treba da ima hamiltonijan sistema spinova uredjenih po čvorovima rešetke. Ovakav ha-miltonijan se može izvesti na osnovu sledećih rasmatranja. Ha-miltonijan kao operator energije mora biti skalarna veličina, pa je očigledno da je hamiltonijan za dva spina na dva čvora rešetke \bar{n} i \bar{m} proporcionalan skalarnom proizvodu ($\bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}}$) spinova u ovim čvorovima. Faktor proporcionalnosti je kao što smo već videli posledica sile izmene izmedju elektrona, obeležava se sa $I_{\bar{n}\bar{m}}$ i naziva se integralom izmene. Prema tome, po-što je za dva čvora

$$H_{\bar{n},\bar{m}} = -\frac{1}{2} I_{\bar{n}\bar{m}} (\hat{S}_{\bar{n}} \hat{S}_{\bar{m}})$$

očigledno je da će ukupni hamiltonijan kristala biti suma iz-raza $H_{\bar{n}\bar{m}}$ po svim čvorovima rešetke tj.

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} \quad (\bar{n} \neq \bar{m}). \quad (I.1.7)$$

Treba napomenuti da je faktor $\frac{1}{2}$ došao usled toga što je inter-akcija u smeru $\bar{n}\bar{m}$ ista kao interakcija u smeru $\bar{m}\bar{n}$, pa bi bez ovoga faktora energija bila udvojena. Negativan predznak je izabran zbog toga da bi sistem imao negativnu energiju osnovnog stanja, tj. da bi se nalazio u potencijalnoj jami, a ne na po-tencijalnom bedemu. Ako se posmatrani sistem nalazi u spoljašnjem magnetnom polju \mathcal{H} , onda hamiltonijam (I.1.7) ima dodatni član koji predstavlja sumu energija po čvorovima koja dolazi usled prisustva magnetnog polja. Kao što je poznato spinovi se uvek orijentišu duž magnetnog polja, pa je energija koja dolazi usled prisustva magnetnog polja data sa

$$-\mu_B \bar{S}_{\bar{n}} \bar{\mathcal{H}} = -\mu_B S_{\bar{n}}^z \mathcal{H}$$

za jedan čvor rešetke, a za ceo kristal kao suma po svim čvoro-vima.

Prema tome, kompletan hamiltonijan sistema za sistem spinova u magnetnom polju, pri čemu uzimamo z-osu za osu kvantiza-cije, ima oblik:

$$H = -\mu_B \mathcal{H} \sum_{\bar{n}} S_{\bar{n}}^z - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} \quad (I.1.8)$$

u ovoj formuli M_B je magnetni momenat atoma dat u Borovim magnetonima.

Dobijeni izraz (I.1.8) za hamiltonijan sistema predstavlja hamiltonijan Hajzenbergovog izotropnog modela. Integrali izmene $I_{\bar{n}\bar{m}}$ su simetrične funkcije koeficijenata \bar{n} i \bar{m} tj.

$$I_{\bar{n}\bar{m}} = I_{\bar{m}\bar{n}} \quad (\text{I.1.9})$$

i zavise od intenziteta razlike $|\bar{n} - \bar{m}|$. Ovo je očigledno na osnovu činjenice da je $I_{\bar{n}\bar{m}}$ došlo usled sila izmedju elektrona koje su centralnog karaktera (kulonovske sile). Takođe znamo da je energija $I_{\bar{n}\bar{m}}$ energija izmene izmedju elektrona, a eksplicitni oblik za integrale izmene mogao bi se dobiti opštim računima kojim se ovakve veličine izračunavaju. Ispostavlja se međutim, da su talasne funkcije elektrona nepotpunjenih atomskih ljudski za atome vezane u kristal u toj meri deformisane, da nikakvo modeliranje ovih talasnih funkcija do danas nije dalo zadovoljavajuće rezultate pri izračunavanju integrala izmene. Zbog toga se veličine $I_{\bar{n}\bar{m}}$ na sadašnjem stadijumu razvoja teorije uzimaju kao fenomenološki parametri i na osnovu eksperimentirana se zna da su reda veličine 1000 K_B za jake feromagnete (Fe, Co, Ni) i reda veličine 100 K_B za retke zemlje. Ovi podaci dolaze iz eksperimentalnih rezultata za temperature prelaza feromagnetika. Finija eksperimentalna istraživanja pokazuju da integrali izmene eksponencijalno opadaju sa porastom veličine $|\bar{n} - \bar{m}|$, pa se zbog toga u teoriji magnetizma aproksimacija najbližih suseda može smatrati za veoma dobru i realnu aproksimaciju.

2. Hajzenbergov i Izingov model

Zadržimo se nešto detaljnije na hamiltonijanu (I.1.8).

Pošto se, kao što smo već rekli, procesi u feromagnetiku sastoje od narušavanja uredjenosti sistema usled povećane temperaturе ili mehaničkih dejstava, a to s druge strane znači otklanjanje z projekcije spinova po čvorovima od maksimalne vrednosti $(S^z)_{\max} = S$, potrebno je hamiltonijan (I.1.8) izraziti preko operatora S^+ i S^- koji povećavaju odnosno smanjuju z projekciju i operatora $S - S^z$ koji očigledno predstavlja meru odstupanja z projekcije od njene maksimalne vrednosti.

Ovo ćemo postići na sledeći način:

Pošto je

$$S^+ = S^x + iS^y \quad ; \quad S^- = S^x - iS^y \quad (\text{I.2.1})$$

odavde lako nalazimo da je:

$$S^x = \frac{S^+ + S^-}{2} \quad ; \quad S^y = \frac{S^+ - S^-}{2i} \quad (\text{I.2.2})$$

Na osnovu ovoga, izraz (I.1.8) možemo transformisati na sledeći način:

$$\begin{aligned} H &= -\mu_B \hbar \sum_{\bar{n}} S_{\bar{n}}^z - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} = \\ &= \mu_B \hbar \sum_{\bar{n}} [S - (S - S_{\bar{n}}^z)] - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} (S_{\bar{n}}^x S_{\bar{m}}^x + S_{\bar{n}}^y S_{\bar{m}}^y + S_{\bar{n}}^z S_{\bar{m}}^z) = \\ &= -\mu_B \hbar S \sum_{\bar{n}} 1 + \mu_B \hbar \sum_{\bar{n}} (S - S_{\bar{n}}^z) - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \frac{(S_{\bar{n}}^+ + S_{\bar{n}}^-)(S_{\bar{m}}^+ + S_{\bar{m}}^-) - (S_{\bar{n}}^+ - S_{\bar{n}}^-)(S_{\bar{m}}^+ - S_{\bar{m}}^-)}{4} - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} [S - (S - S_{\bar{n}}^z)][S - (S - S_{\bar{m}}^z)] = \end{aligned}$$

$$= -\mu_B \mathcal{H} S \sum_{\bar{n}} 1 - \frac{1}{2} S^2 \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} +$$

$$+ \frac{S}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} (S - S_{\bar{n}}^z) +$$

$$+ \frac{S}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} (S - S_{\bar{m}}^z) -$$

$$- \frac{1}{4} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} (S_{\bar{n}}^- S_{\bar{m}}^+ + S_{\bar{m}}^- S_{\bar{n}}^+) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} (S - S_{\bar{n}}^z)(S - S_{\bar{m}}^z)$$

Dalje imamo

$$\sum_{\bar{n}} 1 = N \quad - \text{gde je } N \text{ broj atoma u kristalu}$$

$$\sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} = \sum_{\bar{n}\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}} \sum_{\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}} \sum_{\bar{n}} 1 = N \sum_{\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}} = NJ_0$$

$$(\bar{\ell} = \bar{n} - \bar{m})$$

gde je

$$J_0 = \sum_{\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}} \quad (I.2.3)$$

$$\sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} (S - S_{\bar{n}}^z) = \sum_{\bar{n}\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}} (S - S_{\bar{n}}^z) = \sum_{\bar{n}} (S - S_{\bar{n}}^z) \sum_{\bar{\ell}} I_{\bar{\ell}} =$$

$$= J_0 \sum_{\bar{n}} (S - S_{\bar{n}}^z)$$

$$\begin{aligned} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} (S - S^z_{\bar{m}}) &= \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{m}-\bar{n}} (S - S^z_{\bar{n}}) = \\ &= \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} (S - S^z_{\bar{n}}) = J_0 \sum_{\bar{n}} (S - S^z_{\bar{n}}) \\ &- \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} (S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} + S^-_{\bar{m}} S^+_{\bar{n}}) = \\ &= \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} + \\ &+ \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} S^-_{\bar{m}} S^+_{\bar{n}} = \\ &= \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} + \\ &+ \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{m}-\bar{n}} S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} = \\ &= \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} + \\ &+ \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} = 2 \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}-\bar{m}} S^-_{\bar{n}} S^+_{\bar{m}} \end{aligned}$$

Na osnovu ovoga imamo konačno:

$$H = H_0 + H_2 + H_4 \quad (I.2.4)$$

gde je

$$H_0 = -N(M_B \mathcal{H} S + \frac{1}{2} J_0 S^2) \quad (I.2.5)$$

$$H_2 = (M_B \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\bar{n}} (S - S_{\bar{n}}^z) - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} I_{\bar{n} \bar{m}} S_{\bar{n}}^- S_{\bar{m}}^+ \quad (I.2.6)$$

$$H_4 = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} I_{\bar{n} \bar{m}} (S - S_{\bar{n}}^z)(S - S_{\bar{m}}^z) \quad (I.2.7)$$

Kao što vidimo sada nam je hamiltonijan sistema Hajzenbergovog feromagnetika izražen preko operatora koji odgovaraju fizičkim procesima u sistemu uredjenih spinova, a to su S^- i S^+ koji menjaju vrednost z projekcije i operatora $S-S^z$ koji je mera promene z projekcije. Hamiltonijan H_0 je energija osnovnog stanja feromagnetika, tj. ona energija kada su sve z projekcije u svim čvorovima međusobno jednake i jednake intenzitetu spina S .

Posle ovih detaljnih rasmatranja o Hajzenbergovom modelu zadržaćemo se na tzv. Izingovom modelu koji predstavlja grublji model nego Hajzenbergov, jer se u njemu ignorisu oni delovi hamiltonijana koji su odgovorni za prenos ekscitacija sa čvora na čvor, tj.

$$H_{\text{transfer}} = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} I_{\bar{n} \bar{m}} S_{\bar{n}}^- S_{\bar{m}}^+$$

Prema tome, hamiltonijan Izingovog modela ima oblik

$$H_0 = -N(M_B \mathcal{H} S + \frac{1}{2} J_0 S^2) + (M_B \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\bar{n}} (S - S_{\bar{n}}^z) - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m}} (S - S_{\bar{n}}^z)(S - S_{\bar{m}}^z) \quad (I.2.8)$$

Zbog isključenja prenosa zakoni disperzije za spinske talase ne zavise u Izingovom modelu od talasnog vektora. U tom smislu Izingov model daje veoma loše rezultate na niskim temperaturama. U okolini tačke prelaza Izingov model se često koristi i rezultati koje on daje isti su kao i rezultati metoda molekulranog polja [6]. Treba još naglasiti da se za jednodimenzionalni i dvodimenzionalni Izingov model može egzaktno naći statistička suma koja odgovara hamiltonijanu (I.2.8) (poznato rešenje Onzagera [23]).

3. Pokušaji usavršavanja Hajzenbergovog modela

Hamiltonian Hajzenbergovog feromagnetika može se generalisati na više raznih načina.

Ako posmatrani kristal ima složenu magnetnu čeliju (tj. ima više podrešetki), onda se hamiltonian sistema za više podrešetki dobija odgovarajućim usložavanjem vektora \bar{n} i \bar{m} u hamiltonijanu (I.2.8.), tj.

$$\bar{n} \rightarrow \bar{n} + \bar{r}_a \quad ; \quad \bar{m} \rightarrow \bar{m} + \bar{r}_a \quad (I.3.1)$$

gde su \bar{n} i \bar{m} sada vektori složene čelije, a vektori \bar{r}_a i \bar{r}_b vektori atoma unutar čelije. Ovakav slučaj ćemo u 4 detaljnije analizirati tj. posmatraćemo slučaj antiferomagnetika i feromagnetika.

Ako se uzme u obzir da na povišenim temperaturama atomi počinju da osciluju oko svojih ravnotežnih položaja i ako želimo da ovaj efekat uzmemo u obzir, onda u hamiltonijanu (I.2.8) treba razložiti integral izmene po stepenima pomeranja atoma iz njihovih ravnotežnih položaja. Pošto oscilovanje atoma karakterišu kvazičestice nazvane fononi, uračunavanje ovog efekta na napred opisani način dovelo bi nas do jednog opštijeg hamiltonijana koji pored članova datih u formuli (I.2.8) sadrži još i hamiltonian sistema fonona i hamiltonian interakcije izmedju spinova i fonona.

Kompletan hamiltonian sistema spinova i fonona ima oblik:

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} S_{\bar{n}} S_{\bar{m}} + \sum_{\bar{q}j} (\hat{b}_{\bar{q}j}^\dagger \hat{b}_{\bar{q}j} + \frac{1}{2}) \hbar \omega_{\bar{q}j} +$$

$$+ \sum_{\bar{k}\bar{j}\bar{n}\bar{m}} A_{\bar{k}\bar{j}}(\bar{n}-\bar{m}) \bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} (\bar{b}_{\bar{k}\bar{j}} - \bar{b}_{\bar{k}\bar{j}}^+) (e^{i\bar{k}\bar{n}} - e^{i\bar{k}\bar{m}})$$

gde je

$$A_{\bar{k}}(\bar{n}-\bar{m}) = i \sqrt{\frac{\hbar}{2NM\omega_{\bar{k}j}}} (e_{\bar{k}} \nabla_{\bar{n}-\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}})$$

i

$\bar{b}_{\bar{k}\bar{j}}$ i $\bar{b}_{\bar{k}\bar{j}}^+$ — operatori anihilacije i kreacije fonona

Poznata je činjenica da su magnetni materijali uglavnom metali što znači da oni pored lokalizovanih spinova u 3d lješkama imaju i slobodne (valentne) elektrone sa svojim spinovima, tako da je očigledno da u njima uvek egzistira interakcija izmedju sistema lokalizovanih elektrona i sistema valentnih elektrona. Model koji uzima u obzir ovu interakciju naziva se S-d model ili model Vonskog. [24] Tjabilikov str.326.

Hamiltonijan modela se može predstaviti kao:

$$H = H_{ss} + H_{dd} + H_{sd}$$

gde je

$$H_{ss} = \sum_{\bar{k}\bar{\sigma}} E_{\bar{k}\bar{\sigma}} a_{\bar{k}\bar{\sigma}}^+ a_{\bar{k}\bar{\sigma}} \quad - \text{elektronski hamiltonijan}$$

Čisti Hajzenbergov model

$$H_{dd} = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} \quad - \text{spinski hamiltonijan}$$

$$H_{sd} = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} B_{\bar{n}-\bar{m}} \left\{ S_{\bar{n}}^z \left[a_{\bar{m}}^+ \left(-\frac{1}{2} \right) a_{\bar{m}} \left(-\frac{1}{2} \right) - a_{\bar{m}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) a_{\bar{m}} \left(\frac{1}{2} \right) \right] + \right.$$

$$+ S_{\bar{n}}^x \left[a_{\bar{m}}^+ \left(-\frac{1}{2} \right) a_{\bar{m}} \left(\frac{1}{2} \right) + a_{\bar{m}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) a_{\bar{m}} \left(-\frac{1}{2} \right) \right] + \\ + S_{\bar{n}}^y \left[a_{\bar{m}}^+ \left(\frac{1}{2} \right) a_{\bar{m}} \left(-\frac{1}{2} \right) - a_{\bar{m}}^+ \left(-\frac{1}{2} \right) a_{\bar{m}} \left(\frac{1}{2} \right) \right]$$

Već smo napomenuli da pored interakcije izmene između spinova postoji i dipol-dipolna interakcija koja je za dva reda veličine manja od interakcije izmene. Uzimanje u obzir ovih interakcija generališe formulu (I.2.8) na taj način što se na desnoj strani dodaju dopunski članovi koji karakterišu dipol-dipolnu interakciju. Ovakav model nosi naziv Hajzenbergov model sa dipolnim interakcijama. [25]

Hamiltonijan sistema ima oblik:

$$H = - \sum_{\bar{n}} \bar{\mathcal{H}} \bar{S}_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} - \\ - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} D_{\bar{n}\bar{m}} \left[\bar{S}_{\bar{n}} \bar{S}_{\bar{m}} - 3(\bar{E}_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{n}})(\bar{E}_{\bar{n}\bar{m}} \bar{S}_{\bar{m}}) \right]$$

gdje je

$$D_{\bar{n}\bar{m}} = \frac{M_B^2}{|\bar{n}-\bar{m}|^3} ; \quad \bar{E}_{\bar{n}\bar{m}} = \frac{\bar{n}^2 - \bar{m}^2}{|\bar{n}-\bar{m}|}$$

$$\alpha = x, y, z$$

Ovaj model će biti detaljno analiziran u trećoj glavi, tako da se na njemu ovde nećemo duže zadržavati.

4. Feromagnetići i antiferomagnetići

Do sada smo posmatrali samo feromagnetne strukture, a to znači proste rešetke u kojima se osnovno stanje definiše tako što se pretpostavlja da su svi spinovi paralelni. Eksperimenti pokazuju da osim feromagnetnih materijala postoji magnetni materijali koji se ne mogu uklopiti u dosadašnju shemu jer su im fizičke karakteristike bitno različite od karakteristika feromagnetika. Ukoliko se ostane u granicama izotropnog modela, formalno uopštavanje hajzenbergovog modela, time što se od proste rešetke prelazi na složenu, može da da hamiltonijane koji dobro opisuju ponašanje magnetnih materijala koji nisu feromagnetići.

Hamiltonijan opšteg izotropnog modela može se napisati u obliku

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{ab} I_{ab} \bar{S}_a \bar{S}_b - \sum_a (M_a \bar{S}_a) \bar{H} \quad (I.4.1)$$

U formuli (I.4.1) I_{ab} su potencijali izmenskog karaktera, a S spinski operatori. Bitna generalizacija sastoji se u tome što su (a) i (b) složeni indeksi

$$a = (\bar{n}\Theta) = \bar{n} + \bar{\chi}_{\bar{n}}^{\theta} \quad ; \quad b = (\bar{m}\omega) = \bar{m} + \bar{\chi}_{\bar{m}}^{\omega} \quad (I.4.2)$$

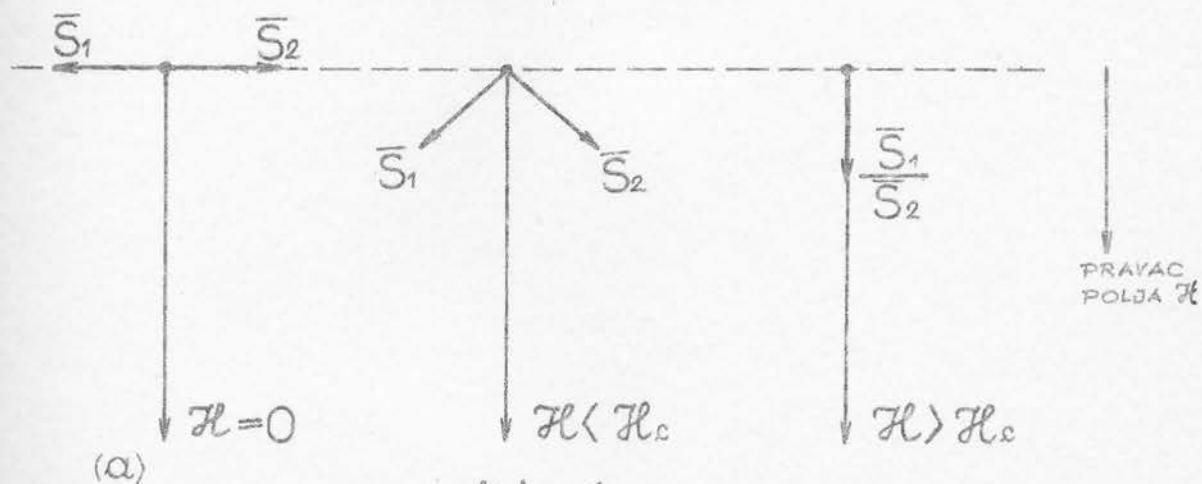
$$\Theta, \omega = 1, 2, \dots,$$

Vektori \bar{n} i \bar{m} su vektori položaja složene magnetne celije, a vektori $\bar{\chi}_{\bar{n}}$ i $\bar{\chi}_{\bar{m}}$ definišu položaje različitih atoma unutar celija \bar{n} odnosno \bar{m} , što znači da hamiltonijan (I.4.1) odgovara sistemu od W spinskih podrešetki koje se uzajamno pržimaju. Pošto u formuli (I.4.1) i spinski operatori imaju složene indekse, to znači da se rasmatra sistem od W podrešetki pri čemu su spinovi po podrešetkama međusobno različiti po veličini i u osnovnom stanju spinovi svake od podrešetki mogu imati različite orijentacije. Osnovni problem korektne analize sistema spinova sa hamiltonijanom (I.4.1) predstavlja nalaženje onih orijentacija koje odgovaraju minimalnoj energiji osnovnog stanja. Obično se ovaj problem rešava primenom varijacionog principa.

Pomenuti slučaj (više podrešetki od kojih svaka ima spin različite veličine i različite orijentacije) odgovara magnetnim materijalima koji se nazivaju ferimagneticima. Jedan poseban slučaj ferimagnetika je takav sistem koji ima više podrešetki sa spinovima različite veličine, ali su svi međusobno

paralelni. Ovakav sistem naziva se feromagnetik sa više podrešetki. Takođe se u analizama izdvaja još jedan poseban slučaj, a to je sistem sa dve podrešetke od kojih svaka ima spinove iste veličine, ali su oni orijentisani antiparalelno. Ovakav sistem naziva se antiferomagnetik i prve teorijske analize ovakvih sistema dao je NELL. [26-28]

Očigledno je na osnovu definicije antiferomagnetika da je njegov ukupni magnetni momenat u osnovnom stanju ravan nuli ukoliko se sistem ne nalazi u spoljašnjem magnetnom polju. Ukoliko se uključi spoljašnje magnetno polje, spinovi obeju podrešetki "skreću" ka pravcu polja tako da uključivanje spoljašnjeg magnetnog polja dovodi do toga da rezultujući momenat antiferomagnetika u osnovnom stanju nije ravan nuli. U teoriji antiferomagnetika uvodi se i pojam kritičnog magnetnog polja \mathcal{H}_c . Jačina kritičnog magnetnog polja je ona veličina polja posle koje dolazi do paralelne orijentacije spinova obeju rešetki, što praktično znači da antiferomagnet postaje feromagnet sa dve podrešetke. Različite moguće situacije u antiferomagnetu date su na slici broj



-slika 1-

Pitanjima, vezanim za kritično polje i energiju osnovnog stanja antiferomagnetika, biće posvećena V glava disertacije, pa se zato ovde na detaljima nećemo zadržavati. Napomenućemo samo da analogno Kirijevoj temperaturi kod feromagnetika u teoriju antiferomagnetika definišemo NELL-ovu temperaturu i to je ona temperatura na kojoj susceptibilnost antiferomagnetika ima singularitet. NELL-ove temperature su obično za red veličine niže od Kirijevih temperatura, što znači da su reda 10^2 K°.

II G L A V A

MAGNETIZACIJA FEROMAGNETIKA I KRITIČNA TEMPERATURA

1. Dajsonov razvoj za magnetizaciju na niskim temperaturama

Hamiltonijan Hajzenbergovog feromagnetika ima sledeći oblik:

$$H = S \mathbb{J}_0 \sum_{\vec{n}} (S - S_{\vec{n}}^z) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} I_{\vec{n} \vec{m}} S_{\vec{n}}^- S_{\vec{m}}^+ - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} (S - S_{\vec{n}}^z)(S - S_{\vec{m}}^z) \quad (\text{III.1.1})$$

Ovde smo uzeli da je spoljašnje magnetno polje ravno nuli, pa otuda u prvom članu hamiltonijana nema dela proporcionalnog $\mu_B \mathcal{H}$.

Prvo ćemo izvršiti analizu ovoga sistema na niskim temperaturama. Ovom problemu posvećeno je mnogo radova [4-10] i dugo među autorima nije bilo pune saglasnosti po pitanju termodinamičkih karakteristika ovakvog sistema na niskim temperaturama. Naročito je bilo diskutabilno pitanje prve anharmonijske korekcije u izrazu za magnetizaciju sistema. Tačnu teoriju dao je Dajson [29, 30] 1956. godine. Mi nećemo ulaziti u detalje Dajsonove teorije koja je veoma glomazna, već ćemo navesti samo njene osnovne ideje.

Po Dajsonu spinski operatori se mogu zameniti Boze operatorima B^+ i B i to na sledeći način:

$$\begin{aligned} S^+ &= \sqrt{2S} B - \frac{1}{\sqrt{2S}} B^+ B B \\ S^- &= \sqrt{2S} B^+ \quad ; \quad S - S^z = B^+ B \end{aligned} \quad (\text{III.1.2})$$

Treba napomenuti da je ovakva zamena spinskih operatora Boze operatorima opravdana samo na niskim temperaturama i ne može se primenjivati u oblasti visokih temperatura. Osim toga, pada u oči da prelaz (III.1.2) vodi na neermitski hamiltonijan jer operator S^- nije adjungovan operatoru S^+ . Veći deo Dajsonove teorije ustvari predstavlja dokaz da član

$$\frac{1}{\sqrt{2S}} B^+ B B$$

kojim bi trebalo dopuniti S^- da bi hamiltonijan bio ermitski, daje eksponencijalno male popravke termodinamičkim veličinama feromagnetika, pa se zato može odbaciti.

Posle zamene (II.1.2) u (II.1.1) dobija se efektivni bozonski hamiltonijan sistema u obliku:

$$\begin{aligned} H = & S \int_0 \sum_{\bar{n}} B_{\bar{n}}^+ B_{\bar{n}} - S \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} B_{\bar{n}}^+ B_{\bar{m}} + \\ & + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} B_{\bar{n}}^+ B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}} B_{\bar{n}} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} B_{\bar{n}}^+ B_{\bar{m}}^+ B_{\bar{m}} B_{\bar{n}} \end{aligned} \quad (\text{II.1.3})$$

Zakon disperzije za magnone naći ćemo metodom masenog operatora. To znači da ćemo ceo hamiltonijan tretirati kao perturbaciju osnovnog stanja. Na osnovu opšte teorije potražićemo funkciju Grina:

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^H B_{\bar{y}}^H] \rangle = \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^J B_{\bar{y}}^J H] \rangle_b \quad (\text{II.1.4})$$

gde je \hat{T} Dajsonov hronološki operator koji uređuje operatore po vremenu, indeks H -označava operator u Hajzenbergovoj reprezentaciji, a indeks J označava označava operator u reprezentaciji interakcije. Simbol $\langle \dots \rangle$ označava srednju vrednost po G i b -ovom ansamblu indeks "b" - da treba uzeti samo vezane dijagrame. Svakom $I_{\bar{n}\bar{m}}$ korespondiraće talasastu liniju $\sim\sim$, svakoj nultoj funkciji Grina

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^J(\bar{\tau}, t) B_{\bar{y}}^J(\bar{\tau}', t')] \rangle$$

običnu liniju —, svakom srednjem broju $\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^+(\bar{\tau}) B_{\bar{x}}(\bar{\tau})] \rangle$ isprekidanu liniju --- i izrazu $S \int_0$ kružić \circlearrowleft .

Na osnovu (II.1.3) i (II.1.4) možemo pisati:

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^H B_{\bar{y}}^H] \rangle S \int_0 \sum_{\bar{n}} \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^J B_{\bar{n}}^J B_{\bar{n}}^J B_{\bar{y}}^J] \rangle_b -$$

$$-\frac{S}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle_b + \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{m}}^j E] \rangle_b$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle_b$$

Treba napomenuti da operatori $B_{\bar{x}}$ i $B_{\bar{y}}$ deluju u dva različita momenta vremena t_x i t_y respektivno, a operatori sa indeksima \bar{m} i \bar{n} u momentima vremena $t = t_0$.

Primenjujući na srednje vrednosti Vi k o v u teoremu i vodeći računa o tome da članovi proporcionalni

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle$$

daju nevezane dijagrame, imamo:

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle_b = \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle$$

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle_b = \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle$$

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle_b =$$

$$= \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle +$$

$$+ \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle +$$

$$+ \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \times \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{y}}^j] \rangle +$$

$$+ \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{g}}^j] \rangle.$$

$$\langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j B_{\bar{x}}^j] \rangle_b =$$

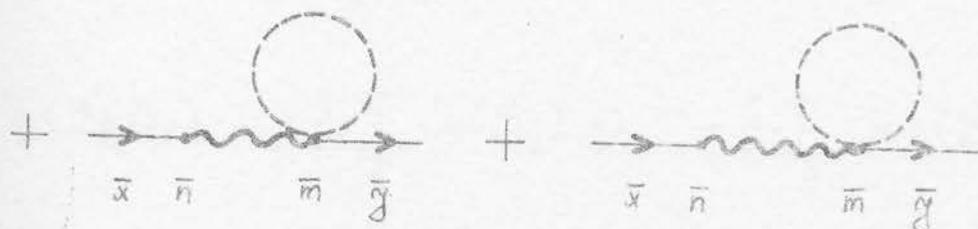
$$= \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{g}}^j] \rangle +$$

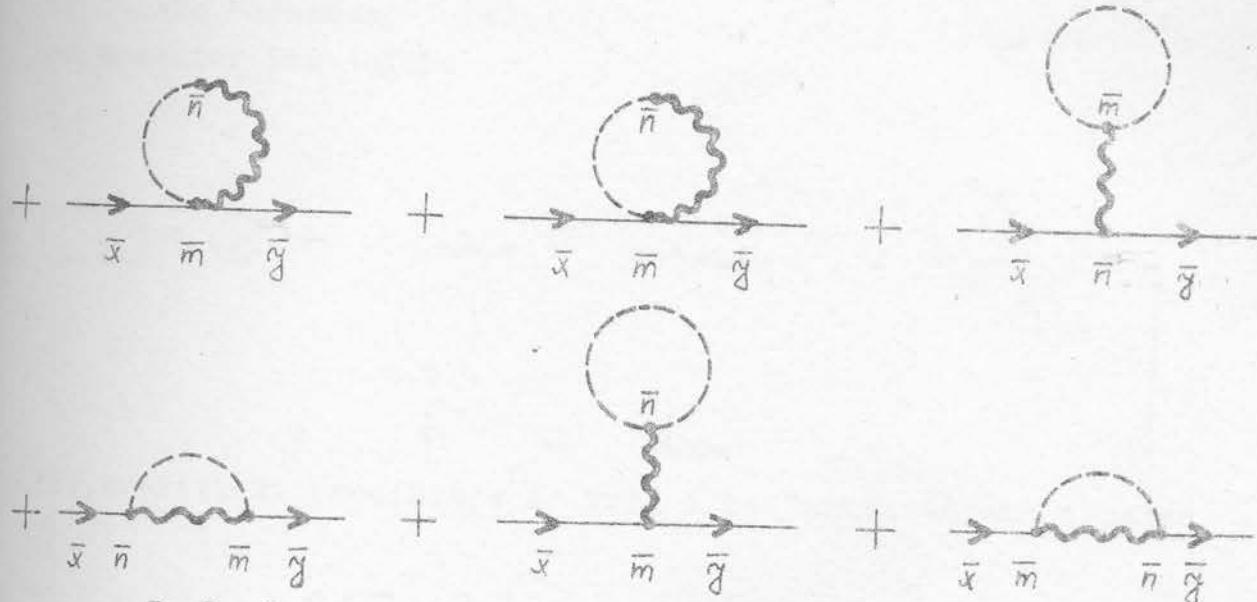
$$+ \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{g}}^j] \rangle +$$

$$+ \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{g}}^j] \rangle +$$

$$+ \langle \hat{T} [B_{\bar{x}}^j B_{\bar{m}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{n}}^j B_{\bar{n}}^j] \rangle \langle \hat{T} [B_{\bar{m}}^j B_{\bar{g}}^j] \rangle.$$

Na osnovu ovoga, jednačina se može grafički predstaviti:





Posle F u r i j e transformacije svih linija, u impulsnom prostoru imamo sledeću grafičku jednačinu:

$$\begin{aligned}
 & S J_0 \quad -S J_{\bar{k}} \quad \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} J_{\bar{g}} \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle \\
 & \text{---} \rightarrow \text{---} \rightarrow + \quad \text{---} \rightarrow \bar{k} \quad + \quad \text{---} \rightarrow \bar{k} \quad \text{---} \rightarrow \bar{k} \\
 & + \quad \text{---} \rightarrow \bar{g} \quad + \quad \text{---} \rightarrow \bar{g} \quad + \quad \text{---} \rightarrow \bar{g} \\
 & + \quad \text{---} \rightarrow \bar{g} \quad + \quad \text{---} \rightarrow \bar{g} \quad + \quad \text{---} \rightarrow \bar{g} \\
 & \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} J_{\bar{g}} \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle \quad -\frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} J_{\bar{g}} \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle \quad -\frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} J_{\bar{g}} \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle
 \end{aligned}$$

$$J_{\bar{k}} = \sum_{\bar{n}} I_{\bar{n}0} e^{i \bar{\omega} \bar{n}}$$

Ako "odsečemo" ulazne i izlazne linije dijagrama, masevi operator ima oblik:

$$\boxed{\text{diagram}} = \oplus + \text{diagram} + \text{diagram} + \text{diagram} + \\ + \text{diagram} + \text{diagram}$$

ili, analitički (sumiranje se vrši i po "unutrašnjem" impulsu \vec{q}):

$$E(\vec{k}) = S(J_0 - J_{\vec{k}}) + \\ + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_0 - J_{\vec{k}-\vec{q}}) \langle B_{\vec{q}}^+ B_{\vec{q}} \rangle \quad (\text{III.1.6})$$

Dobijeni izraz za $E(\vec{k})$ predstavlja traženu energiju elementarnih ekscitacija u prvom redu teorije perturbacije.

Magnetizacija sistema se definiše kao:

$$\mathcal{G} = \frac{\langle S^z \rangle}{S} = 1 - \frac{1}{S} \langle B^+ B \rangle \quad (\text{III.1.7})$$

Ako se ograničimo aproksimacijom najbližih suseda i malih talasnih vektora (izraze $J_{\vec{k}}$ - razvijemo sa tačnošću šestog stepena talasnog vektora) u prostoj kubnoj rešetki, za magnetizaciju dobijamo izraz:

$$\mathcal{G} = 1 - \frac{1}{S} \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{1}{e^{\frac{E(\vec{k})}{\theta}} - 1} = \\ = 1 - \frac{1}{S} \xi_{3/2}^{-1} T^{3/2} - \frac{1}{S} \frac{3\theta}{4} \xi_{5/2}^{-1} T^{5/2} - \frac{1}{S} \frac{33\theta}{32} \xi_{7/2}^{-1} T^{7/2} - \\ - \frac{1}{S^2} \frac{3\theta}{2} \xi_{3/2}^{-1} \xi_{5/2}^{-1} T^4 + O(T^{9/2})$$

$$\mathcal{C} = \frac{\theta}{4\pi SI} ; \quad \xi_p = \sum_{n=1}^{\infty} \frac{1}{n^p} \quad (\text{II.1.8})$$

Prva dva člana ove formule predstavljaju poznati Blochov zakon " $T^{3/2}$ " za magnetizaciju [31-33]. Prva popravka koja dolazi usled anharmonijskih efekata je proporcionalna T^{-1} i negativna je (s tim u vezi vidi literaturu [34-50]). Sama formula primenljiva je u oblasti temperatura $(0, T_c/2)$ gde je T_c - kritička temperatura.

Ako u izrazu za energiju (II.1.6) zanemarimo član proporcionalan koncentraciji $\langle B_q^+ B_q^- \rangle$, a ostatak formule razvijemo sa tačnošću do kvadrata talasnog vektora, onda dobijamo:

$$E_{(\bar{k})}^{(0)} = S I a^2 \kappa^2 = \frac{\frac{\hbar^2 \kappa^2}{\pi^2}}{S I a^2} = \frac{p^2}{2m^*} \quad (\text{II.1.9})$$

$$m^* = \frac{\hbar^2}{2S I a^2} ; \quad a - \text{konstanta rešetke} ; \quad I - \text{integral izmene za najbliže susede}$$

Kao što vidimo, u oblasti malih impulsa spinski talas se ponaša kao slobodna čestica sa kinetičkom energijom $\frac{p^2}{2m^*}$ i "efektivnom" masom $m^* = \frac{\hbar^2}{2S I a^2}$.

Član

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} (J_{\bar{k}} + J_{\bar{g}} - J_0 - J_{\bar{k}-\bar{g}}) \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}}^- \rangle$$

je oblika $C T^{5/2} k^2 a^2$, a to znači da, ako se uzmu u obzir anharmonijski efekti u sistemu spinova, efektivna masa zavisi od temperature.

2. Metod haotičnih faza i metod molekularnog polja

U oblasti visokih temperatura, kao što smo već napomenuli, Dajsonove formule (II.1.2) se ne mogu primeniti. Da bi se dobila formula za magnetizaciju koja dobro interpolira ponašanje feromagnetika od nulte temperature do temperature prelaza, zgodnije je računati sa spinskim operatorima ne prelazeći na Bozo-operatore [51-58]. Ovakvi računi su manje tačni od Dajsonovog koji smo ovde izveli, ali zato daju mogućnost da se feromagneti analizira i u okolini Kirijeve temperature.

Mi ćemo ovde analizirati feromagnetik koristeći paulionsku i kvazi-paulionsku reprezentaciju za spinske operatore [59-60] (vidi dodatak). Prvo ćemo analizirati feromagnetik čiji je efektivni spin $S = \frac{1}{2}$, a zatim, sa nešto manje detalja, feromagnetik sa spinom $S > \frac{1}{2}$ na visokim temperaturama.

U slučaju $S = \frac{1}{2}$ spinski operatori se mogu zameniti Pauli operatorima i to na sledeći način:

$$S^+ = P ; \quad S^- = P^+ ; \quad S^z = \frac{1}{2} - P^+ P \quad (\text{II.2.1})$$

Ako u (II.1.1) zamenimo (II.2.1) hamiltonijan sistema postaje:

$$\begin{aligned} H = & \frac{1}{2} J_0 \sum_{\bar{n}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{m}} \end{aligned} \quad (\text{II.2.2})$$

Za paulionsku funkciju Grina

$$\langle\langle P_{\bar{f}} | P_{\bar{g}}^+ \rangle\rangle$$

možemo postaviti jednačinu:

$$E \langle\langle P_{\bar{f}} | P_{\bar{g}}^+ \rangle\rangle = \frac{i}{2\pi} \langle 1 - 2 P_{\bar{f}}^+ P_{\bar{f}} \rangle \delta_{\bar{f}\bar{g}} + \quad (\text{II.2.3})$$

$$+ \langle\langle [P_{\bar{f}}, H] | P_{\bar{g}}^+ \rangle\rangle$$

Napominjemo da je ovde izvršena dama Furije-transformacija energija - vreme.

Na osnovu (II.2.1) i definicije $G = \frac{\langle S^z \rangle}{S}$ možemo pisati:

$$G = \frac{\langle S^z \rangle}{S} = \langle 1 - 2R_f^+ R_f \rangle \quad (\text{II.2.4})$$

1

$$\begin{aligned} [P_f, H] = & \frac{1}{2} J_0 P_f - \frac{1}{2} \sum_{\bar{m}} I_{f\bar{m}} P_{\bar{m}} + \\ & + \sum_{\bar{m}} I_{f\bar{m}} R_f^+ R_f R_{\bar{m}} - \sum_{\bar{m}} I_{f\bar{m}} R_{\bar{m}}^+ R_{\bar{m}} R_f \end{aligned} \quad (\text{II.2.5})$$

Tada jednačina (II.2.3) postaje

$$\begin{aligned} E \langle P_f | P_g^+ \rangle = & \frac{iG \delta_{fg}}{2\pi} + \frac{1}{2} J_0 \langle P_f | P_g^+ \rangle - \frac{1}{2} \sum_{\bar{m}} I_{f\bar{m}} \langle P_{\bar{m}} | P_g^+ \rangle + \\ & + \sum_{\bar{m}} I_{f\bar{m}} \langle P_f^+ R_f R_{\bar{m}} | P_g^+ \rangle - \sum_{\bar{m}} I_{f\bar{m}} \langle P_{\bar{m}}^+ R_{\bar{m}} R_f | P_g^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.2.6})$$

Ako više funkcije Grina dekuplujemo na sledeći način

$$\langle P_f^+ R_f R_{\bar{m}} | P_g^+ \rangle \approx \langle R_f^+ R_f \rangle \langle P_{\bar{m}} | P_g^+ \rangle = \frac{1-G}{2} \langle P_{\bar{m}} | P_g^+ \rangle \quad (\text{II.2.7})$$

$$\langle P_{\bar{m}}^+ R_{\bar{m}} R_f | P_g^+ \rangle \approx \langle P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{m}} \rangle \langle P_f | P_g^+ \rangle = \frac{1-G}{2} \langle P_f | P_g^+ \rangle$$

$$\langle R_f^+ R_f \rangle = \frac{1-G}{2}$$

onda jednačina (II.2.5) postaje:

$$E \langle R_f | R_g^+ \rangle = \frac{iG\delta_{fg}}{2\pi} + \frac{G}{2} J_0 \langle R_f | R_g^+ \rangle - \\ - \frac{G}{2} \sum_m I_{fm} \langle R_m | R_g^+ \rangle \quad (II.2.6)$$

Aproksimacija (III.2.7) koju smo upotrebili naziva se aproksimacija haotičnih faza (RPA) i fizički označava zamenu procesa rasejanja spinskih talasa na stvarnom potencijalu I_{nm} procesom prenosa spinskih talasa kroz efektivno polje

$$I_{nm} \langle P^+ P \rangle$$

koje je funkcija temperature.

Ako u (II.2.8) izvršimo Furije transformacije:

$$R_f = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k R_k e^{ikf}$$

$$R_g = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\bar{g}} R_{\bar{g}}^+ e^{-i\bar{g}\bar{g}}$$

$$\delta_{fg} = \frac{1}{N} \sum_k e^{i\bar{k}(f-\bar{g})}$$

Za paulinsku funkciju Grina $\langle R_k | R_k^+ \rangle$ dobijamo sledeću jednačinu

$$\langle R_k | R_k^+ \rangle = \frac{iG}{2\pi} \frac{1}{E - \frac{G}{2} (J_0 - J_k)} \quad (II.2.9)$$

Zakon disperzije za magnone je pol funkcije:

$$E(\bar{k}) = \frac{G}{2} (J_0 - J_{\bar{k}}) \quad (\text{II.2.10})$$

Srednji magnonski broj, pomoću spektralne intenzivnosti funkcije $\langle P_{\bar{k}} | P_{\bar{k}}^+ \rangle$ je:

$$\langle P_{\bar{k}}^+ P_{\bar{k}} \rangle = \frac{G}{e^{\frac{E(\bar{k})}{2\theta}} - 1} \quad (\text{II.2.11})$$

Odavde je magnetizacija

$$G = 1 - 2 \langle P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{n}} \rangle = 1 - \frac{2G}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{1}{e^{\frac{(J_0 - J_{\bar{k}})}{2\theta}} - 1} \quad (\text{II.2.12})$$

$$G = \frac{1}{1 + \frac{2}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{1}{e^{\frac{G(J_0 - J_{\bar{k}})}{2\theta}} - 1}} \quad (\text{II.2.13})$$

Magnetizaciju u okolini temperature prelaza iz feromagnetične u paramagnetičnu fazu naći ćemo koristeći formulu (II.2.12). Pri tome, pošto se tačka prelaza definiše kao ona temperatura na kojoj spontana magnetizacija isčezava, koristićemo se činje-

nicom da je \tilde{G} blisko nuli. Zbog toga što je \tilde{G} malo, možemo isvršiti sledeću transformaciju:

$$e^{\frac{\tilde{G}(J_0 - J_{\bar{k}})}{2\theta}} = e^{\frac{\tilde{G}J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)} \cong 1 + \frac{\tilde{G}J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right) +$$

$$+ \frac{1}{2} \cdot \frac{\tilde{G}^2 J_0^2}{4\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^2 +$$

$$+ \frac{1}{6} \cdot \frac{\tilde{G}^3 J_0^3}{8\theta^3} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^3$$

Sada je

$$\frac{1}{e^{\frac{\tilde{G}(J_0 - J_{\bar{k}})}{2\theta}} - 1} \cong \frac{1}{\frac{\tilde{G}J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right) + \frac{1}{2} \tilde{G}^2 \left(\frac{J_0}{2\theta}\right)^2 \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^2 + \dots}$$

$$+ \frac{1}{6} \tilde{G}^3 \left(\frac{J_0}{2\theta}\right)^3 \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^3 \cong \frac{1}{\frac{\tilde{G}J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)} \left[1 - \frac{1}{2} \tilde{G} \frac{J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right) + \dots \right]$$

$$+ \frac{1}{6} \tilde{G}^2 \left(\frac{J_0}{2\theta}\right)^2 \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^2 + \frac{1}{4} \tilde{G}^2 \left(\frac{J_0}{2\theta}\right)^2 \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^2 \cong$$

$$\cong \frac{1}{\frac{\tilde{G}J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)} \left[1 - \frac{1}{2} \tilde{G} \frac{J_0}{2\theta} \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right) + \dots \right]$$

$$+ \frac{1}{12} \tilde{G}^2 \left(\frac{J_0}{2\theta}\right)^2 \left(1 - \frac{J_{\bar{k}}}{J_0}\right)^2 \cong$$

$$\cong \frac{1}{G} \frac{2\Theta}{J_0} \frac{J_0}{J_0 - J_{\bar{k}}} - \frac{1}{2} + \frac{1}{12} G \frac{J_0}{2\Theta} \frac{J_0 - J_{\bar{k}}}{J_0}$$

(II.2.14)

Ako ovo zamenimo u formuli (II.2.12), dobijemo:

$$G = 1 - \frac{4\Theta}{J_0} \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{J_0}{J_0 - J_{\bar{k}}} + G - \\ - \frac{1}{6} G^2 \frac{J_0}{2\Theta} \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{J_0 - J_{\bar{k}}}{J_0}$$

Pošto je:

$$\sum_{\bar{k}} J_{\bar{k}} = 0$$

dalje dobijamo:

$$\frac{1}{6} G^2 \frac{J_0}{2\Theta} = 1 - \frac{4\Theta}{J_0} \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{J_0}{J_0 - J_{\bar{k}}}$$

Sumu

$$\frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{J_0}{J_0 - J_{\bar{k}}}$$

koja očigledno zavisi od strukture magnetne rešetke obeležavamo sa C. Tada je:

$$G = \sqrt{\frac{12\Theta}{J_0}} \sqrt{1 - \frac{4C}{J_0} \Theta}$$

(II.2.15)

Na osnovu dobijene formule mi vidimo da je $G = 0$ za

$$\Theta = \frac{J_0}{4C} \quad i \quad \Theta = 0$$

Druge rešenje je besmisленo, jer znamo da je $\Theta = 0$, $G = 1$.
Ono je posledica činjenice da je aproksimacija (II.2.14) loša
u oblasti $\Theta \approx 0$.

Rešenje

$$\Theta = \Theta_c = \frac{J_0}{4C} \quad (\text{II.2.16})$$

je temperatura prelaza ili Kirijeva temperatura.

Formula (II.2.15) na osnovu (II.2.16) može se napisati
kao

$$G = \sqrt{\frac{3}{C}} \sqrt{\frac{\Theta}{\Theta_c}} \sqrt{1 - \frac{\Theta}{\Theta_c}}$$

ili, ako u prvom korenu stavimo $\Theta \approx \Theta_c$

$$G = \sqrt{\frac{3}{C}} \sqrt{1 - \frac{\Theta}{\Theta_c}}$$

$$\Theta_c = \frac{J_0}{4C} \quad (\text{II.2.17})$$

$$C = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{J_0}{J_0 - J_{\bar{k}}}$$

Za prostu kubnu strukturu je $C = 1,516$ (vidi ref. [6]) i
 $J_0 = 6I$ pa je

$$G \approx \sqrt{2} \sqrt{1 - \frac{\Theta}{\Theta_c}} \quad (\text{II.2.18})$$

$$\Theta_c \approx I$$

Što znači da je temperatura prelaza približno jednaka vrednosti integrala izmene za najbliže susede.

Diferenciranjem izraza (II.2.17) po Θ dobijamo:

$$\frac{dG}{d\Theta} = -\frac{1}{2\Theta_c} \sqrt{\frac{3}{c}} \cdot \frac{1}{\sqrt{1-\frac{\Theta}{\Theta_c}}} \quad (\text{III.2.19})$$

odakle sledi

$$\lim_{\Theta \rightarrow \Theta_c} \frac{dG}{d\Theta} = \pm \infty \quad (\text{III.2.20})$$

Na osnovu klasifikacije faznih prelaza, uslov (III.2.19) pokazuje da je prelaz iz feromagnetne u paramagnetu fazu fazi prelaz druge vrste.

Na kraju, možemo još analizirati ponašanje našeg sistema u paramagnetroj fazi. Kao što je poznato, u paramagnetroj fazi je spontana magnetizacija ravna nuli. Međutim, ako postoji spoljašnje magnetno polje \mathcal{H} , spinovi se uredjuju u smeru polja tako da se pojavljuje indukovana magnetizacija. Ovo znači da analizu sistema u paramagnetroj fazi možemo koristiti formulu (II.2.10), ali da nadjenom zakonu disperzije treba dodati energiju koju za jedan spin stvara spoljašnje magnetno polje. Ova energija, kao što je poznato, ravna je $M_B \mathcal{H}$, gde je M_B magnetni momenat atoma u Borovim magnetonima.

Znači, u paramagnetroj fazi možemo koristiti formulu:

$$E(\bar{k}) = M_B \mathcal{H} + \frac{G}{2} (J_0 - J_{\bar{k}}) \quad (\text{III.2.21})$$

kao zakon disperzije. Magnetizacija je data formulom

$$G = \frac{1}{1 + \frac{2}{N} \sum_{\bar{k}} \frac{1}{e^{\frac{\mu_B \mathcal{H} + \frac{G}{2}(J_0 - J_{\bar{k}})}{2\theta}} - 1}}$$

koja se posle elementarnih transformacija u imeniku svodi na

$$G = \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \operatorname{Cotgh} \left[\frac{\mu_B \mathcal{H}}{2\theta} + \frac{G(J_0 - J_{\bar{k}})}{4\theta} \right]} \quad (\text{III.2.22})$$

Pošto je:

$$\operatorname{Cotgh} (x+y) = \frac{1 + \operatorname{th} x \cdot \operatorname{th} y}{\operatorname{th} x + \operatorname{th} y}$$

Možemo pisati da je:

$$\operatorname{Cotgh} \left[\frac{\mu_B \mathcal{H}}{2\theta} + \frac{G(J_0 - J_{\bar{k}})}{4\theta} \right] =$$

$$= \frac{1 + \operatorname{th} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2\theta} \operatorname{th} \frac{G(J_0 - J_{\bar{k}})}{4\theta}}{\operatorname{th} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2\theta} + \operatorname{th} \frac{G(J_0 - J_{\bar{k}})}{4\theta}} = \frac{1 + t_o t_{\bar{k}}}{t_o + t_{\bar{k}}}$$

$$t_o = \operatorname{th} \frac{\mu_B \mathcal{H}}{2\theta} \quad (\text{III.2.23})$$

$$t_{\bar{k}} = \operatorname{th} \frac{G(J_0 - J_{\bar{k}})}{4\theta}$$

Očigledno da je u paramagnetskoj fazi $G \approx 0$, pa je $t \gg t_{\bar{\kappa}}$

Izraz

$$\frac{1 + t_0 t_{\bar{\kappa}}}{t_0 + t_{\bar{\kappa}}}$$

možemo transformisati na sledeći način:

$$\frac{1 + t_0 t_{\bar{\kappa}}}{t_0 + t_{\bar{\kappa}}} = \left(\frac{1}{t_0} + t_{\bar{\kappa}} \right) \frac{1}{1 + \frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0}} =$$

$$= \left(\frac{1}{t_0} + t_{\bar{\kappa}} \right) \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \left(\frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \right)^m =$$

$$= \frac{1}{t_0} + \frac{1}{t_0} \sum_{m=1}^{\infty} (-1)^m \left(\frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \right)^m +$$

$$+ t_0 \frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \left(\frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \right)^m =$$

$$= \frac{1}{t_0} + \frac{1}{t_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \right)^n + t_0 \sum_{m=0}^{\infty} (-1)^m \left(\frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \right)^{m+1}$$

Ako u poslednjoj sumi izvršimo zamenu $m+1 = n$; $m = 0$; $n = 1$;
 $(-1)^m = - (-1)^n$ imamo

$$\begin{aligned}
 \frac{1+t_0 t_{\bar{k}}}{t_0 + t_{\bar{k}}} &= \frac{1}{t_0} + \frac{1}{t_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{k}}}{t_0} \right)^n - \\
 &- t_0 \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{k}}}{t_0} \right)^n = \\
 &= \frac{1}{t_0} + \frac{1-t_0^2}{t_0} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{k}}}{t_0} \right)^n
 \end{aligned}
 \tag{II.2.24}$$

Na osnovu ovoga formulu (II.2.22) možemo pisati kao:

$$G = \frac{1}{\frac{1}{t_0} + \frac{1-t_0^2}{t_0} \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{k}}}{t_0} \right)^n} \tag{II.2.25}$$

Pošto je $t_k \ll t_0$ ograničimo se linearom aproksimacijom po odnosu

$$\frac{t_{\bar{k}}}{t_0}$$

tj. uzećemo:

$$\sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{k}}}{t_0} \right)^n \cong -\frac{t_{\bar{k}}}{t_0}$$

Takođe ćemo uzeti

$$t_{\bar{\kappa}} = t \hbar \frac{G(J_0 - J_{\bar{\kappa}})}{4\theta} \approx \frac{G(J_0 - J_{\bar{\kappa}})}{4\theta}$$

pa je:

$$\frac{1}{N} \sum_{\bar{\kappa}} \sum_{n=1}^{\infty} (-1)^n \left(\frac{t_{\bar{\kappa}}}{t_0} \right)^n \approx - \frac{GJ_0}{4\theta} \frac{1}{t_0} \quad (\text{II.2.26})$$

Posle ove aproksimacije možemo pisati:

$$G = \frac{1}{\frac{1}{t_0} - \frac{t_0^2 - 1}{t_0^2} \frac{GJ_0}{4\theta}} = \frac{t_0}{1 + \frac{t_0^2 - 1}{t_0} \frac{GJ_0}{4\theta}}$$

Ili, u linearnoj aproksimaciji po G

$$G \approx t_0 \left[1 - \frac{t_0^2 - 1}{t_0} \frac{GJ_0}{4\theta} \right] = \quad (\text{II.2.27})$$

$$= t_0 + (1 - t_0^2) \frac{GJ_0}{4\theta}$$

U nultoj aproksimaciji uzećemo $\tilde{G}^{(0)} = t_0$

Tada u prvoj aproksimaciji, na osnovu (II.2.27) imamo:

$$\tilde{G}^{(1)} = t_0 + (1 - t_0^2) \frac{t_0 J_0}{4\theta} =$$

$$= t_0 \left(1 + \frac{J_0}{4\theta} \right) - t_0^3 \frac{J_0}{4\theta}$$

(II.2.28)

Magnetna susceptibilnost definiše se kao

$$\chi = M_B \lim_{x \rightarrow 0} \frac{dG}{dx} \quad (\text{II.2.29})$$

Ako uzmemo izraz za G (II.2.28) i u njemu zamenimo

$$t_0 = \operatorname{th} \frac{M_B \mathcal{H}}{2\theta}$$

dobijamo:

$$\chi_m = \lim_{x \rightarrow 0} M_B \left\{ \left(1 + \frac{J_0}{4\theta} \right) \frac{d}{dx} \operatorname{th} \frac{M_B \mathcal{H}}{2\theta} - \right.$$

$$\left. - \frac{J_0}{4\theta} \frac{d}{dx} \operatorname{th}^3 \frac{M_B \mathcal{H}}{2\theta} \right\} =$$

$$= M_B \left(1 + \frac{J_0}{4\theta} \right) \lim_{x \rightarrow 0} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{M_B \mathcal{H}}{2\theta}} \frac{M_B}{2\theta} -$$

$$- \frac{J_0}{4\theta} \lim_{x \rightarrow 0} \operatorname{th}^2 \frac{M_B \mathcal{H}}{2\theta} \frac{1}{\operatorname{ch}^2 \frac{M_B \mathcal{H}}{2\theta}} \frac{M_B}{2\theta}$$

$$\chi = \frac{M_B^2}{2\theta} \left(1 + \frac{J_0}{4\theta} \right)$$

(II.2.30)

Pošto je $\frac{J_0}{4}$ približno jednako nadjenoj temperaturi prelaza (II.2.17), daleko u paramagnetskoj fazi možemo uzeti da je $\frac{J_0}{4\Theta} \ll 1$ i pisati:

$$1 + \frac{J_0}{4\Theta} = 1 + \frac{J_0/4}{\Theta} \approx \frac{1}{1 - \frac{J_0/4}{\Theta}} = \frac{\Theta}{\Theta - \frac{J_0}{4}} \quad (\text{II.2.31})$$

tako da konačno dobijamo:

$$\chi = \frac{1}{2} M_s^2 \frac{1}{\Theta - \Theta_c^{MF}} \quad ; \quad \Theta_c^{MF} = \frac{J_0}{4} \quad (\text{II.2.32})$$

tj. poznati zakon Kiri - Vajs-a o ponašanju susceptibilnosti za paramagnete.

Veličina $\Theta_c^{MF} = \frac{J_0}{4}$ je temperatura prelaza koju daje metod molekularnog polja. Mi smo tačnijem metodom RPA našli da je $\Theta_c = \frac{J_0}{4\zeta}$. Metod molekularnog polja sastojao bi se u tome što bi se iz hamiltonijana (II.2.2) izbacio član

$$-\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} P_n^\dagger P_{\bar{m}}$$

i zatim na isti način kao i metodom RPA našla magnetizacija i njena nula. Ovaj prilaz bi dao da je $G = 0$ za $\Theta = \frac{J_0}{4}$.

Analognu analizu za spin $S > \frac{1}{2}$ i visoke temperature izvršićemo koristeći kvazi-paulionsku reprezentaciju spinskih operatora [3] (vidi dodatak takodje). Ova reprezentacija sastoji se u korespondiranju para operatora svakoj promeni Z projekcije spina. Na osnovu [3] možemo pisati:

$$S_{\bar{n}}^+ = \sum_{\mu=1}^{2S} \left[M(2S+1-M) \right]^{1/2} P_{\mu-1,\bar{n}}^\dagger P_{\mu\bar{n}}$$

$$\bar{S}_{\bar{n}} = \sum_{M=1}^{2S} \left[M(2S+1-M) \right]^{\frac{1}{2}} \mathcal{P}_{\bar{n}}^+ \mathcal{P}_{M-1, \bar{n}} \quad (\text{II.2.33})$$

$$\bar{S}_{\bar{n}} = S - \sum_{M=1}^{2S} M \mathcal{P}_{M\bar{n}}^+ \mathcal{P}_{M\bar{n}}$$

$$\mathcal{P}_{o\bar{n}} = \mathcal{P}_{o\bar{n}}^+ = 1$$

Pošto je magnetizacija, na osnovu (II.2.33) dati su

$$G = \frac{\langle \bar{S}_{\bar{n}}^z \rangle}{S} = 1 - \frac{1}{S} \sum_{M=1}^{2S} M \langle \mathcal{P}_{M\bar{n}}^+ \mathcal{P}_{M\bar{n}} \rangle \quad (\text{II.2.34})$$

naš zadatak je da metodom funkcije Grina nadjemo $2S$ srednjih vrednosti $\langle \mathcal{P}_{M\bar{n}}^+ \mathcal{P}_{M\bar{n}} \rangle$. Zamenom (II.2.33) u hamiltonijanu (II.1.1), mi dobijamo hamiltonijan sistema u kvazipaulionskoj reprezentaciji:

$$\begin{aligned} H = & S J_0 \sum_{\bar{n}} \sum_{M=1}^{2S} M \mathcal{P}_{M\bar{n}}^+ \mathcal{P}_{M\bar{n}} - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \sum_{M=1}^{2S} \sum_{D=1}^{2S} M D \mathcal{P}_{M\bar{n}}^+ \mathcal{P}_{M\bar{n}} \mathcal{P}_{D\bar{m}}^+ \mathcal{P}_{D\bar{m}} - \end{aligned}$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}} I_{\bar{n}\bar{m}} \sum_{M=1}^{2S} \sum_{\mu=1}^{2S} a_{\mu} a_{\nu} P_{\mu\bar{n}}^+ P_{\mu-1,\bar{n}}^- P_{\nu-1,\bar{m}}^+ P_{\nu\bar{m}}^- \quad (\text{II.2.35})$$

$$a_{\mu} = \left[\mu(2S+1-\mu) \right]^{\frac{1}{2}} \quad (\text{II.2.36})$$

Operator $S_{\bar{n}}$ dat je sa:

$$S_{\bar{n}} = a_1 P_{1\bar{n}}^+ + a_2 P_{2\bar{n}}^+ P_{\bar{m}}^- + \dots + a_{2S} P_{2S,\bar{n}}^+ P_{2S-1,\bar{n}}^-$$

Operator $P_{\bar{m}}^+$ označava "obaranje" projekcije $S \rightarrow S - 1$, sledeći proces je "dizanje" projekcije $S - 1 \rightarrow S$ sa novim "obaranjem" $S \rightarrow S - 2$ itd. Na niskim temperaturama, zbog male energije topločnih kvanta aktuelan je samo proces $S \rightarrow S - 1$. U okolini Kiri tačke aktuelni su svi procesi, jer topločni kvanti imaju veliku energiju. Otuda je fizički očigledno da sistem funkcija Grina

$$a_1 G_{\bar{n}-\bar{m}}^{(1)} = \langle S_{\bar{n}}^+ | P_{\bar{m}}^+ \rangle$$

$$a_s G_{\bar{n}-\bar{m}}^{(s)} = \langle S_{\bar{n}}^+ | P_{\bar{s}\bar{m}}^+ P_{\bar{s}-1,\bar{m}}^- \rangle$$

$$s = 2, 3, \dots, 2S \quad (\text{II.2.37})$$

realno opisuje sve procese u okolini Θ_c .

Izražavajući $S_{\bar{n}}^+$ prema formulama (II.2.33) i (II.2.37), uzimajući komutatore sa hamiltonijenom (II.2.37) i primenjujući RPA aproksimaciju, mi dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$\begin{aligned} [E - GS(J_0 - J_K)] G_{\bar{\kappa}}^{(1)} &= \frac{i}{2g} (1 - N_1 - \sum_{\omega=1}^{2S} N_{\omega}) \\ [E - GS(J_0 - J_K)] G_{\bar{\kappa}}^{(s)} &= \frac{i}{2g} (N_{s-1} - N_s) \end{aligned} \quad (\text{II.2.38})$$

$s = 2, 3, 4, \dots, 2S$

$$N_s = \langle \mathcal{P}_s^+ \mathcal{P}_s \rangle$$

gde je

$$G_{\bar{n}-\bar{m}}^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{\kappa}} G_{\bar{\kappa}}^{(1)} e^{i\bar{\kappa}(\bar{n}-\bar{m})} = \sum_{\alpha=1}^{2S} \frac{a_{\alpha}}{a_1} \langle \langle \mathcal{P}_{\alpha-1, \bar{n}}^+ \mathcal{P}_{\alpha, \bar{n}} | \mathcal{P}_{1\bar{m}}^+ \rangle \rangle$$

(II.2.39)

$$G_{\bar{n}-\bar{m}}^{(s)} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{\kappa}} G_{\bar{\kappa}}^{(s)} e^{i\bar{\kappa}(\bar{n}-\bar{m})} = \sum_{\alpha=1}^{2S} \frac{a_{\alpha}}{a_1} \langle \langle \mathcal{P}_{\alpha-1, \bar{n}}^+ \mathcal{P}_{\alpha, \bar{n}} | \mathcal{P}_{s\bar{m}} \mathcal{P}_{s-1, \bar{m}} \rangle \rangle$$

$s = 2, 3, 4, \dots, 2S$

Koristeći spektralne intenzivnosti funkcija $G_{\bar{\kappa}}^{(1)}$ i $G_{\bar{\kappa}}^{(s)}$ nalazimo:

$$N_1 = (1 - N_1 - \sum_{\omega=1}^{2S} N_{\omega}) \phi$$

$$N_s = (N_{s-1} - N_s) \phi$$

$s = 2, 3, \dots, 2S$

(II.2.40)

$$\phi = \frac{1}{N} \sum_{\bar{\kappa}} \frac{1}{e^{\frac{E_g(\bar{\kappa})}{\Theta}} - 1}$$

$$E_g(\bar{\kappa}) = S(J_0 - J_{\bar{\kappa}})$$

Zamenom (II.2.40) u (II.2.34) dobijamo:

$$G = 1 - \frac{\Omega}{S} \frac{d}{d\Omega} \ln \frac{1 - \Omega^{2S+1}}{1 - \Omega} \quad (\text{II.2.41})$$

$$\Omega = (1 + \phi^{-1})^{-1}$$

Raslažući Ω i ϕ^{-1} sa tačnošću do G^3 dobijamo konačno:

$$G = \sqrt{\frac{20}{3} \frac{(S+1)^2}{5C - 4 + (1+2S)^2} \frac{\Theta}{\Theta_c} \left(1 - \frac{\Theta}{\Theta_c}\right)^{\frac{1}{2}}} \quad (\text{II.2.42})$$

$$\Theta_c = \frac{S(S+1)}{3C} J_0$$

$$C = \frac{1}{n} \sum_{\bar{\kappa}} \frac{J_0}{J_0 - J_{\bar{\kappa}}}$$

Kao što vidimo za $S = \frac{1}{2}$ dobijamo

$$\Theta_c = \frac{J_0}{4C} \quad (\text{II.2.43})$$

tj. rezultat (II.2.11).

U slučaju molekularnog polja konstanta C postaje ravna jedinici tako da temperatura prelaza iznosi

$$\Theta_{MF} = \frac{S(S+1)}{3} J_0$$

Za slučaj spina $S = \frac{1}{2}$ na osnovu poslednje formule dobija-
mo

$$\Theta_{MF} = \frac{J_0}{4}$$

3. Bosonska polja u analizi kritične temperature

U prethodnom paragrafu analizirali smo ponašanje feroma-
gnetičkih u okolini kritične temperature koristeći dve različi-
te aproksimacije: aproksimaciju molekularnog polja i aproksi-
maciju haotičnih faza. Za feromagnet sa spinom $S = \frac{1}{2}$ i proste
kubne strukture našli smo da kritična temperatura po moleku-
larnom polju iznosi $J_0/4$, dok po metodu haotičnih faza njena
vrednost je približno $J_0/6$. U paramagnetskoj fazi oba metoda
davala su K i $r_i - W_a$ ov zakon sa istim temperaturnim
singularitetom na temperaturi $\Theta_E = J_0/4$.

Pošto je verovanja da oba ova metoda daju višu kritičnu
temperaturu no što ona iznosi realno. Osim toga, oba metoda
dovode do rezultata da je fazni prelaz u feromagneticima čist
fazni prelaz druge vrste. Što se tiče prelaznih metala (Fe, Co,
Ni), ovi rezultati mogu da se ocene kao kvalitativno zadovo-
ljavajući, međutim pri analizi feromagnetizma retkih zem-
lja mnogi eksperimentalno dobijeni rezultati ne uklapaju se
u teoriju molekularnog polja, a ni u nešto bolju teoriju ha-
otičnih faza.

Osnovni nedostatak pomenutih teorijskih prileza (kao i
nekih drugih) sastoji se u tome, što se sve analize vrše uz
prepostavku da feromagnet ima pobudjenja samo jednog tipa, tj.
spinske talase ili magnone. Što se tiče niskih temperatura,
kada je dovoljno raditi sa dvokvazičestičnim interakcijama
račun sa samo jednim tipom pobudjenja da i dalje zadovolja-

vajuće rezultate, ali u okolini temperature prelaza naglo raste doprinosi od multi-kvazičestičnih interakcija koji ne moraju da budu samo temperaturska "doterivanja" zakona disperzije za magnone. Radi se o tome, da multi-čestične interakcije kao i multi-kvazičestične interakcije dovode do stvaranja novih tipova ekscitacija. Tipičan primer za ovo su plazmoni koji su teorijski predviđeni tako što je kod multi-čestične elektronske Grinove funkcije pronađen dopunski pol koji je odgovarao kvazi-česticama bozonskog tipa. Tako se danas zna, da u elektronskom gasu postoje fermi pobudjenja ("Obuđeni elektroni") koja imaju fermionske karakteristike i pobudjenja Boze tipa (plazmoni) koji predstavljaju fluktuacije elektronske gustine. Mada se za ovu činjenicu zna već 2-3 decenije, do danas se nije pokušavalo sa analognim analizama u kvantnoj teoriji magnetizma. Nedavno u [7,8] je pokazano da u Hajzenbergovom feromagnetiku postoje dopunski nivoi koji se javljaju kao rezultat kinematičke interakcije spinskih talasa koji su nazvani kinematički nivoi. Pokazano je da kinematički nivoi daju zanemarljive doprinose magnetizaciji na niskim temperaturama, dok u okolini kritične tačke dobijaju značajnu ulogu, pa se njihovim prisustvom može objasniti pojava da su mnogi fazni prelazi u feromagneticima de facto fazni prelazi prve vrste veoma bliski faznim prelazima druge vrste, a takođe i česta pojava kod feromagnetika koji pripadaju retkim zemljama, a to je da se iz feromagnetske faze vrši prelaz u antiferomagnetsku fazu, pa tek iz ove u paramagnetsku.

Ovde ćemo ukratko izložiti rezultate rada [8] jer, kao što ćemo videti u sledećem paragrafu, rezultati rada [8] najbliži su rezultatima usavršenog metoda haotičnih faza. U [8] je analiziran Hajzenbergov hamiltonijan sa spinom $S = \frac{1}{2}$, koji je izražen preko Pauli operatora imao oblik

$$H = (\mathcal{K} + \frac{1}{2} J_0) \sum_{\vec{n}} \vec{R} \vec{R}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \vec{P}_{\vec{n}} \vec{P}_{\vec{m}}^\dagger - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} P_{\vec{n}}^\dagger P_{\vec{m}} P_{\vec{n}}^\dagger P_{\vec{m}} \quad (\text{II.3.1})$$

Za Pauli operatore korišćena je egzaktna bozonska reprezentacija iz [59]:

$$R = \hat{f}^{\frac{1}{2}} B_{\bar{n}}; R^+ = B_{\bar{n}}^+ \hat{f}^{\frac{1}{2}},$$

$$RR^+ = \sum_{D=0}^{\infty} \frac{(-2)^D}{(1+D)!} B_{\bar{n}}^{D+1} B_{\bar{n}}^{D+1}$$

$$\hat{f}_{\bar{n}} = \sum_{D=0}^{\infty} \frac{(-2)^D}{(1+D)!} B_{\bar{n}}^D B_{\bar{n}}^D \quad (\text{II.3.2})$$

pri čemu je upotrebljen ceo beskonačni bozonski red. Zbog toga što se koeficijenti operatorske funkcije (\hat{f}) ne mogu izraziti uopšteno, umesto Grinove funkcije $G_{\bar{n}}(t) = \langle R(t) | R^+(0) \rangle$ koja se upotrebljava u analizama ove vrste ispitivana je Gri-nova funkcija

$$\Lambda_{\bar{n}}(t) = \langle \sqrt{1+B_{\bar{n}}^+(t)B_{\bar{n}}(t)} R_{\bar{n}}(t) | R_{\bar{n}}^+(0) \sqrt{1+B_{\bar{n}}^+(0)B_{\bar{n}}(0)} \rangle \quad (\text{II.3.3})$$

gde su B i B^+ Boze operatori. Za funkciju Λ bilo je moguće da se nadju svi koeficijenti beskonačnog reda, pa je ona uz primenu Víkove teoreme izražena preko bozonskih Grinovih funkcija $G_{\bar{n}}(t) = \langle B_{\bar{n}}(t) | B_{\bar{n}}^+(0) \rangle$ i $D\Lambda_{\bar{n}}(t) = \langle B_{\bar{n}}^+(t) | B_{\bar{n}}(0) \rangle$ i srednjeg broja bozona η , na sledeći način:

$$\Lambda_{\bar{n}}(t) = \Omega_1(\eta) G_{\bar{n}}(t) + \Omega_2(\eta) D\Lambda_{\bar{n}}(t) G_{\bar{n}}^2(t) + O(D^2 G^3) \quad (\text{II.3.4})$$

gde je

$$\Omega_1(\eta) = \frac{4\eta^4 + 8\eta^3 + 8\eta^2 + 4\eta + 1}{(2\eta + 1)^4} ; \quad \Omega_2(\eta) = \frac{1}{(2\eta + 1)^6} \quad (\text{II.3.5})$$

Treba napomenuti da su prilikom primene Víkove teoreme vezani svi bozonski produkti u istom vremenu i delovi produkata i delovi produkata za različita vremena, usled čega se pojavio drugi član na desnoj strani formule (II.3.4). Ovaj član daje dopunske energetske nivoe u odnosu na spinske tala-

se. Funkcije λ i Γ povezane su relacijom
 $\langle \overline{1+B^*B}P|P^+|\overline{1+B^*B} \rangle \approx$

$$\approx (1+2\langle B^*B \rangle) \langle P|P^+ \rangle \quad (\text{II.3.6})$$

i konačni rezultat je davao bozonsku funkciju G u sledećem obliku:

$$G_E(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{\gamma(\eta)\xi(\eta)}{E_R - E_K} - \frac{1}{E - E_K} \quad (\text{II.3.7})$$

gde su upotrebljene sledeće oznake:

$$\xi(\eta) = -\frac{\hbar}{2m} \tilde{\Psi}_0 \frac{Q^4}{K^2} \quad ; \quad \tilde{\Psi}_0 = \frac{32}{9} \frac{(4\eta^4 + 8\eta^3 + 8\eta^2 + 4\eta + 1)^3}{(2\eta + 1)^6}$$

$$\tilde{E}_K = \mu H + \frac{\hbar^2 K^2}{2m} \left(1 + \tilde{\Psi}_0 \frac{Q^4}{K^4} \right)$$

$$\langle B_K^+ B_R \rangle = \gamma(\eta) \left\{ \frac{1}{e^{\frac{E_K}{kT}} - 1} - \frac{1}{e^{\frac{E_R}{kT}} - 1} \right\} \quad (\text{II.3.8})$$

Energija predstavlja dopunski nivo koji je nazvan kinematičkim, a energija $E_K = \mu H + \frac{Q}{2} (J_0 - J_K)$ je standarna energija spinskih talasa za metod haotičnih faza. Magnetizacija je data izrazom

$$G = \left\{ 1 + \frac{2\gamma(\eta)}{N} \sum_K \left(\frac{1}{e^{\frac{E_K}{kT}} - 1} - \frac{1}{e^{\frac{E_R}{kT}} - 1} \right) \right\}^{-1} \quad (\text{II.3.9})$$

i kao što vidimo njen ponašanje karakterišu i spinski nivoi E_K i kinematički nivoi \tilde{E}_K .

Korišćenjem gornjih formula nadjena je magnetna susceptibilnost u obliku

$$\chi^{(0)} = \frac{\mu^2 Z}{8C^2} \frac{1}{\Theta - \Theta_c} \quad (\text{II.3.10})$$

gde je

$$Z = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e_k^x} \quad ; \quad C = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e_k}$$

$$\Theta_c = \frac{\Theta_{M.F.}}{4C} \quad ; \quad \Theta_{M.F.} = \frac{1}{4} J_0 \quad (II.3.11)$$

Kao što vidimo ovaj metod daje Kirijevu temperaturu koja je oko šest puta niža od temperature koju daje metod molekularnog polja.

U radu [2] nadjen je izraz za magnetizaciju u okolini temperature prelaza

$$\tilde{G} = \alpha_0(t) + \alpha_2(t)G^2 + \alpha_3(t)G^3 + \alpha_5(t)G^{\frac{7}{2}} + O(G^4) \quad (II.3.12)$$

gde su

$$t = \frac{2\Theta_{M.F.}}{\Theta} ; \quad \alpha_0 = \frac{8C}{3t} - \frac{1}{3} ; \quad \alpha_2 = \frac{\beta t}{3}$$

$$\alpha_3 = \frac{2t^2}{3C^2} ; \quad \alpha_5 = -\frac{8\tilde{B}t^{\frac{5}{2}}}{3} ; \quad \beta = \frac{4}{C} - \frac{2}{3}$$

$$\tilde{B} = \frac{1}{2} \left(\frac{3}{2} \right)^{\frac{5}{2}} (2\tilde{G})^{-\frac{1}{2}} C^{-3} \quad (II.3.13)$$

Analiza izraza II.3.13 pokazuje da izvod magnetizacije po temperaturi postaje beskonačan za $\Theta_\infty = 0,27\Theta_{M.F.}$ ($\Theta_{M.F.} = J_0/4$), dok je Kiri temperatura (odredjena formulom II.3.11) $\Theta_c = 0,16\Theta_{M.F.}$ Ovaj rezultat koji pokazuje da se Kirijeva temperatura i temperatura prelaza razlikuju za 100 - 10 stepeni Kelvinovih ukazuje na činjenicu da u feromagneticima postoji fazni prelaz prve vrste, veoma blizak faznom prelazu druge vrste. Dalja analiza formule (II.3.13) pokazuje da \tilde{G} dostiže molekularnu vrednost za $\Theta_{cc} = 0,89\Theta_{M.F.}$ i da posle ove temperature počne da opada ka nuli. Fizička interpretacija ovog rezultata je očigledna. Ona pokazuje da feromagnet posle temperature $\Theta_c = 0,16\Theta_{M.F.}$ ne prelazi u čistu paramagnetu fazu, već u fazu koja je po

svojim osobinama bliska antiferomagnetskom stanju i da tek na temperaturama višim od Θ_{cc} možemo očekivati paramagnetsko ponašanje.

Na kraju treba istaći da poredjenjem sa rezultatima eksperimenata iz [61] (slike 1 - 5 na stranama 32 i 33 i tablica 7 na strani 35) rezultati gore navedene teorije najviše odgovaraju ponašanju erbijuma (Er) i tulijuma (Tu), mada i ostali lantanidski feromagnetičari mogu da se uklope bar kvalitativno u rezultate teorije.

4. Usavršeni metod haotičnih faza

U drugom paragrafu ove glave izvršili smo analize feromagnetika na visokim temperaturama koristeći metod haotičnih faza (RPA) i dobili rezultat da je za $S = \frac{1}{2}$ i prostu kubnu rešetku temperatura Kiri u energetskim jedinicama ($\Theta_C = K_B T_C$), približno ravna vrednost integrala izmene za najbliže susede. Metod molekularnog polja u istom slučaju dao je $\Theta_{MP} = \frac{J_0}{4}$.

Ovde ćemo pokušati da usavršimo metod haotičnih faza na taj način, što ćemo koristiti tačan zakon disperzije za magnone koji je u prvom paragrafu ove glave. U tom cilju u izrazu za funkciju Grina

$$E\langle\langle R|R_t^+\rangle\rangle = \frac{i}{2\Omega} (1 - 2\langle R_t^+ R_z \rangle) + \frac{1}{2} J_0 \langle\langle R|R_t^+\rangle\rangle -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_m I_{\bar{n}\bar{m}} \langle\langle R|R_t^+\rangle\rangle + \sum_m I_{\bar{n}\bar{m}} \langle\langle R_t^+ R_z R_{\bar{m}} | R_t^+\rangle\rangle -$$

$$-\sum_m I_{\bar{n}\bar{m}} \langle\langle R_t^+ R_z R_{\bar{m}} | R_t^+\rangle\rangle$$

izvršićemo Furije transformacije

(III.4.1)

$$R_{\bar{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k R_k e^{ik\bar{n}} ;$$

$$I_{\bar{n}\bar{m}} = \frac{1}{N} \sum_k J_k e^{ik(n-m)}$$

posle čega ona postaje

$$\begin{aligned} & \left[E - \frac{1}{2} (J_0 - J_{\bar{k}}) \right] \langle R | R^+ \rangle - \frac{i}{2\bar{\kappa}} (1 - 2 \langle R^+ R^- \rangle) + \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}_1 \bar{q}_2} (J_{\bar{k}-\bar{q}_1+\bar{q}_2} - J_{\bar{q}_1-\bar{q}_2}) \langle R_{\bar{q}_2}^+ R_{\bar{q}_1} R_{\bar{k}-\bar{q}_1+\bar{q}_2} | R_{\bar{k}}^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.4.2})$$

Funkciju

$$\langle R_{\bar{q}_2}^+ R_{\bar{q}_1} R_{\bar{k}-\bar{q}_1+\bar{q}_2} | R_{\bar{k}}^+ \rangle$$

dekuplovaćemo na sledeći način:

$$\langle R_{\bar{q}_2}^+ R_{\bar{q}_1} R_{\bar{k}-\bar{q}_1+\bar{q}_2} | R_{\bar{k}}^+ \rangle = \langle R_{\bar{q}_2}^+ R_{\bar{q}_2} \rangle \langle R_{\bar{k}} | R_{\bar{k}}^+ \rangle (\delta_{\bar{q}_1 \bar{q}_2} + \delta_{\bar{q}_1 \bar{k}}) \quad (\text{II.4.3})$$

Tada (II.3.1) postaje:

$$\begin{aligned} & \left[E - \frac{1}{2} (J_0 - J_{\bar{k}}) \right] \langle R | R^+ \rangle - \frac{i}{2\bar{\kappa}} (1 - 2 \langle R^+ R^- \rangle) + \\ & + \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} (J_{\bar{k}} + J_{\bar{q}} - J_0 - J_{\bar{k}-\bar{q}}) \langle R_{\bar{q}}^+ R_{\bar{q}} \rangle \langle R | R^+ \rangle \end{aligned} \quad (\text{II.4.4})$$

Kao što vidimo, ovakvo dekuplovanje dovodi do pravilnog zakona disperzije $E(\bar{k})$ (vidi formulu II.2.18) strana 47.

Pošto je:

$$\begin{aligned} 1 - 2 \langle R^+ R^- \rangle &= G \quad (\text{II.4.5}) \\ \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} \langle R_{\bar{q}}^+ R_{\bar{q}} \rangle &= \langle R_{\bar{q}}^+ R_{\bar{q}} \rangle = \frac{1-G}{2} \end{aligned}$$

jednačina (II.3.3) postaje:

$$E - \frac{G}{2} (J_0 - J_K) -$$

$$- \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} (J_{\bar{g}} - J_{K-\bar{g}}) \langle R_{\bar{g}}^+ R_{\bar{g}} \rangle] \langle R_K | R_K^+ \rangle = \frac{iG}{2\theta}$$

(II.4.6)

Spektralna intenzivnost funkcije $\langle R_K | R_K^+ \rangle$

ima

oblik:

$$\frac{\mathcal{J}(\bar{K}, E)}{\langle R_K | R_K^+ \rangle} =$$

$$= \frac{G}{e^{\frac{E}{\theta}} - 1} \delta \left\{ E - \left[\frac{G}{2} (J_0 - J_K) + \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} (J_{\bar{g}} - J_{K-\bar{g}}) \langle R_{\bar{g}}^+ R_{\bar{g}} \rangle \right] \right\}$$

Na osnovu ovoga, srednji broj pauliona je dat sa

(II.4.7)

$$\langle R_K^+ R_K \rangle = \frac{G}{e^{\frac{G(J_0 - J_K)}{2\theta} + \frac{1}{\theta} \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} (J_{\bar{g}} - J_{K-\bar{g}}) \langle R_{\bar{g}}^+ R_{\bar{g}} \rangle} - 1}$$

Kao što vidimo, srednji broj pauliona dat je jednom nelinearnom integralnom vezom.

Uvodimo označke:

$$\langle R_K^+ R_K \rangle = n(\kappa_x a, \kappa_y a, \kappa_z a) \equiv n(\bar{\kappa}) \quad (\text{II.4.8})$$

$$\frac{G(J_0 - J_K)}{2\theta} = f(\kappa_x a, \kappa_y a, \kappa_z a; \theta) \equiv f(\bar{\kappa}, \theta)$$

Za najbliže susede i prostu kubnu strukturu je:

$$J_{\vec{q}} = 2I(\cos q_x a + \cos q_y a + \cos q_z a)$$

$$\begin{aligned} J_{k-\vec{q}} &= 2I[\cos(q_x - k_x)a + \cos(q_y - k_y)a + \cos(q_z - k_z)a] \\ &= 2I(\cos q_x a \cos k_x a + \cos q_y a \cos k_y a + \\ &+ \cos q_z a \cos k_z a + \sin q_x a \sin k_x a + \\ &+ \sin q_y a \sin k_y a + \sin q_z a \sin k_z a) \quad (\text{II.4.9}) \end{aligned}$$

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} = \frac{a^3}{(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dq_x dq_y dq_z$$

Zamenom (II.4.8) i (II.4.9) u (II.4.6) i posle smene
 $q_x a = x' ; q_y a = y' ; q_z a = z' ; k_x a = x ; k_y a = y \text{ i } k_z a = z$
dobijamo:

$$n(x, y, z) =$$

6

$$\frac{e^{Gf(x, y, z, \theta)} + \frac{2I}{\theta} [C_1(1 - \cos x) + C_2(1 - \cos y) + C_3(1 - \cos z) + \\ + C_4 \sin x + C_5 \sin y + C_6 \sin z]}{1}$$

$$n(x, y, z) \equiv \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \theta) \quad (\text{II.4.10})$$

$$C_1 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} n(x', y', z') \cos x' dx' dy' dz'$$

$$C_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} n(x', y', z') \cos y' dx' dy' dz'$$

$$C_3 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} n(x', y', z') \cos z' dx' dy' dz'$$

(II.4.11)

$$C_4 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} n(x', y', z') \sin x' dx' dy' dz'$$

$$C_5 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} n(x', y', z') \sin y' dx' dy' dz'$$

$$C_6 = \frac{1}{(2\pi)^3} \int_{-\infty}^{\infty} n(x', y', z') \sin z' dx' dy' dz'$$

$$f(x, y, z, \theta) = \frac{I}{\Theta} \sum_{s=1}^3 [G \cos x_s +$$

$$+ 2C_s(1 - \cos x_s) + 2C_{s+3} \sin x_s]$$

Znači $n(x, y, z) = \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta)$ (II.4.)

Množeći sukcesivno jednačinu (II.4.12) sa $\cos x, \cos y,$

$\cos z, \sin x, \sin y, \sin z$ i integraleći po x, y, z od $-\pi$ do π dobijamo:

$$C_1 = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta) \cos x \, dx \, dy \, dz$$

$$C_2 = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta) \cos y \, dx \, dy \, dz$$

$$C_3 = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta) \cos z \, dx \, dy \, dz$$

$$C_4 = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta) \sin x \, dx \, dy \, dz$$

$$C_5 = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta) \sin y \, dx \, dy \, dz$$

$$C_6 = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta) \sin z \, dx \, dy \, dz$$

(II.4.13)

Sistem jednačina (II.4.13) potpuno određuje 6. konstanti $C_1 \dots C_6$. Njihovo određivanje se može izvršiti jedino numerički znači poznavanje broja $n(x, y, z)$ iz formule (II.4.10). Poznavanje ovog broja znači i poznavanje magnetizacije:

$$\mathcal{O} = 1 - \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} dx \, dy \, dz \, n(x, y, z) =$$

$$= 1 - \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} dx \, dy \, dz \, \Phi(x, y, z, C_1, C_2, C_3, C_4, C_5, C_6, \Theta)$$

(II.4.14)

Bilo bi veoma interesantno odrediti Kiri temperaturu iz (II.4.14) jer je ova relacija dobijena korišćenjem tačnijeg zakona disperzije za paulione, nego što je korišćen onaj iz prvog paragrafa ove glave.

Numeričko rešavanje poslednje jednačine izvršeno je na računaru IBM sistema 360/44 sa centralnom memorijom od 128 KB na Prirodno-matematičkom fakultetu u Beogradu i rezultati se mogu dati u vidu sledeće tabele:

$\frac{\theta}{I}$	δ	$\frac{\delta\delta}{\delta\theta}$
0,11	0,82	∞
1,43	0	$\neq 0$
1,44	0,12	0
1,56	0	$\neq 0$

Po analogiji sa rasudjivanjima iz prethodnih paragrafa, dobijeni rezultati mogli bi se interpretirati na sledeći način: $\theta/I = 0,11$ - fazni prelaz druge vrste, $\theta/I = 1,43$ - fazni prelaz fero-antifero, u $\theta/I = 1,44$ maksimum magnetizacije u antifero magnetskoj fazi i za $\theta/I = 1,56$ - fazni prelaz antifero-para.

Interesantno je naglasiti da se rezultati dobijeni usavršenim metodom haotičnih faza kvalitativno slažu sa rezultatima radova [7,8], mada je fizička slika koja stoji iza jednog i drugog prilaza bitno različita; u [7,8] pretpostavlja se prisustvo dopunskog nivoa (radi se sa dve vrste elementarnih ekscitacija), dok ovde imamo jedan nivo (spinske talase), ali koristimo tačan zakon disperzije.

III G L A V A

IZMENSKI I DIPOLNI MAGNETIZAM

1. O dipolnom magnetizmu

Osim izmenskih sila koje su uglavnom odgovorne za magnetne fenomene, izmedju atoma magnetnog kristala deluje sila interakcije magnetnih dipola. Konstanta dipol-dipolne interakcije je veoma mala (od $0,1 - 10 K_B$) tako da dipolne sile i interakciju magnetnih dipola možemo smatrati kao slabu perturbaciju. O ovome će biti posvećena pažnja u sledećim paragrafima ove glave. Ovde ćemo analizirati neka pitanja stabilnosti čistog dipolnog hamiltonijana. Model dipolnog hamiltonijana dali su Holštajn i Primakov 1940 god. [25]. Eksperimentalna istraživanja pokazuju [62] da se u nekim magnetnim materijalima javlja čisto dipolni magnetizam.

Hamiltonijan sistema sa čisto dipolnim interakcijama ima oblik

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{f}\vec{g}} D_{\vec{f}\vec{g}} [\bar{S}_{\vec{f}} \bar{S}_{\vec{g}} - 3(\bar{E}_{\vec{f}\vec{g}} - \bar{S}_{\vec{f}})(\bar{E}_{\vec{f}\vec{g}} - \bar{S}_{\vec{g}})] \quad (\text{III.1.1})$$

gde je

$$D_{\vec{f}\vec{g}} = \frac{\mu_B}{|\vec{f} - \vec{g}|} \quad ; \quad \bar{E}_{\vec{f}\vec{g}} = \frac{\vec{f} - \vec{g}}{|\vec{f} - \vec{g}|} \quad (\text{III.1.2})$$

U ovim formulama \bar{S} su spinski operatori i μ_B je magnetni moment atoma u Borovim magnetonima. Iz izraza za $D_{\vec{f}\vec{g}}$ za najблиže susede $D = \frac{\mu_B^2}{a^3}$ gde je (a) konstanta magnetne rešetke, vidi se da je konstanta dipolne interakcije reda $10^{-15} - 10^{-17}$ erga jer je $\mu_B \sim 10^{-18} - 10^{-19}$ erga/Oersted i $a \sim 10^{-7}$ sm.

Zbog strukture operatora dipol-dipolne interakcije nije sve jedno kako se orijentišu spinovi u osnovnom stanju, ili kako se to drugčije kaže, izbor ose kvantizacije nije proizvođen. Osim toga, izbor ose kvantizacije zavisi od dimenzionalnosti magnetnog kristala, tj. za jednodimenzionalni lanac spi-

nova postoji jedan pravac u kome su upereni spinovi i koji daju minimalnu energiju osnovnog stanja, dok za dvo i trodimenzionalne kristale izbor pravca usmerenja spinova iz jednodimenzionalne strukture ne važi.

Analizu ovog pitanja izvršićemo na kristalima sa prostom kubnom rešetkom jer su računi najprostiji, a dobijene rezultate nije teško proširiti i na slučaj složenih magnetnih rešetki.

Pošmatraćemo jednodimenzionalni lanac spinova i izraz (III.1.1) napisati za najbliže susede

$$H = -\frac{1}{2} \frac{M_B^2}{\alpha^3} \sum_f [\bar{S}_f (\bar{S}_{f+1} + \bar{S}_{f-1}) - 3(\bar{e}_{f,f+1} \bar{S}_f)(\bar{e}_{f,f+1} \bar{S}_{f+1}) -$$

$$- 3(\bar{e}_{f,f-1} \bar{S}_f)(\bar{e}_{f,f-1} \bar{S}_{f-1})]$$

(III.1.3)

Vektor \bar{R}_{fg} koji spaja spinove u čvorovima f i g uperiće-
mo duž z ose što znači da je

$$\bar{e}_{f,f+1} = \bar{K} ; \quad \bar{e}_{f,f-1} = -\bar{K}$$

(III.1.4)

Svi spiđovi su jednak i po osnovnim pretpostavkama teorije magnetizma u osnovnom stanju su paralelni. Pretpostavićemo, da su oni usmereni duž bilo koga pravca u prostoru, a to znači da možemo pisati

$$\bar{S}_f = \bar{S}_{f+1} = \bar{S}_{f-1} = \bar{S}_{f-1} = S(\bar{i} \cos \varphi \sin \theta + \bar{j} \sin \varphi \sin \theta + \bar{k} \cos \theta$$

$$S = |\bar{S}| \quad (III.1.5)$$

Posle zamene (III.1.4) i (III.1.5) u (III.1.3) dobijamo

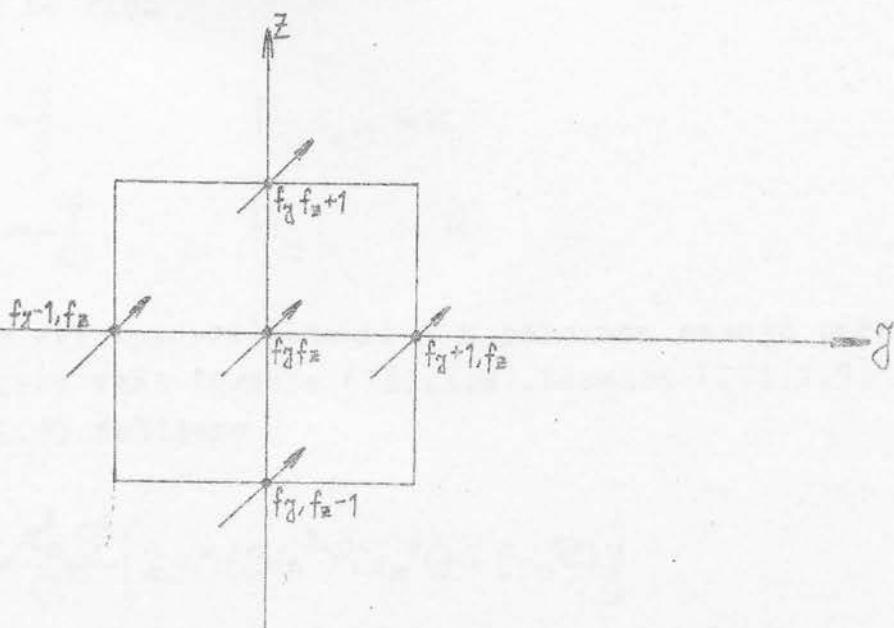
$$H = -N \frac{\kappa_B^2 S^2}{\alpha^3} (1 - 3 \cos^2 \Theta) \quad (\text{III.1.6})$$

Diferenciranjem poslednjeg izraza po Θ lako konstatujemo da izraz ima ekstremnu vrednost za $\Theta = 0$, $|H|_{\text{ext}} = 2N \frac{\kappa_B^2 S^2}{\alpha^3}$. Kao što vidimo, u slučaju jednodimenzionalne rešetke hamiltonijan osnovnog stanja ima ekstremnu vrednost samo onda kada su spinovi upereni duž rešetke.



sl. 1

Takodje konstatujemo, da je ekstremna vrednost maksimum, a ne minimum, pa za jednodimenzionalne rešetke treba redefinisati hamiltonijan (III.1.1) na taj način što ćemo umesto znaka minus ispred sume uzeti znak plus. Rastotrićemo sada slučaj dvo-dimenzionalne rešetke u aproksimaciji najbližih suseda (vidi sliku 2)



sl. 2

možemo pisati

$$\begin{aligned}
 H = & -\frac{1}{2} \frac{\mu_B^2}{\alpha^3} \sum_{f_3 f_2} \left[\bar{S}_{f_3 f_2} (\bar{S}_{f_3+1, f_2} + \bar{S}_{f_3-1, f_2} + \bar{S}_{f_3, f_2+1} + \bar{S}_{f_3, f_2-1}) - \right. \\
 & - 3(\bar{e}_{f_3+1, f_2} \bar{S}_{f_3 f_2}) (\bar{e}_{f_3+1, f_2} \bar{S}_{f_3+1, f_2}) - \\
 & - 3(\bar{e}_{f_3-1, f_2} \bar{S}_{f_3 f_2}) (\bar{e}_{f_3-1, f_2} \bar{S}_{f_3-1, f_2}) - \\
 & - 3(\bar{e}_{f_3, f_2+1} \bar{S}_{f_3 f_2}) (\bar{e}_{f_3, f_2+1} \bar{S}_{f_3, f_2+1}) - \\
 & \left. - 3(\bar{e}_{f_3, f_2-1} \bar{S}_{f_3 f_2}) (\bar{e}_{f_3, f_2-1} S_{f_3, f_2-1}) \right]
 \end{aligned}$$

(III.1.7)

Sa slike se vidi

$$\bar{e}_{f_3+1, f_2} = \bar{j}$$

$$\bar{e}_{f_3, f_2+1} = \bar{K}$$

$$\bar{e}_{f_3-1, f_2} = -\bar{j}$$

$$\bar{e}_{f_3, f_2-1} = -\bar{K}$$

(III.1.8)

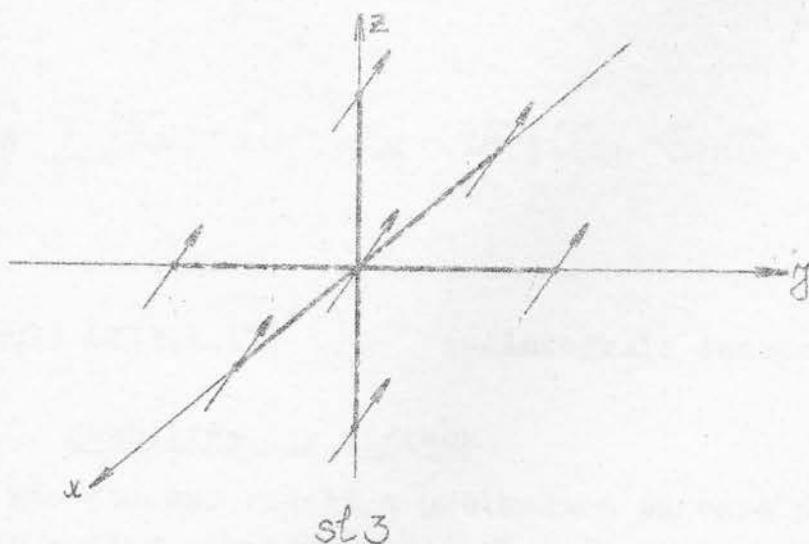
Pošto su svi spinovi jednaki i u osnovnom stanju paralelni, za sve čvorove važi formula (III.1.5). Zamenom (III.1.5) i (III.1.8) u (III.1.7) dobijamo

$$H = -N \frac{\mu_B^2 S^2}{\alpha^3} [2 - 3(\sin^2 \varphi \sin^2 \Theta + \cos^2 \Theta)]$$

(III.1.9)

Lako se može konstatovati da izraz (III.1.9) koji predstavlja energiju osnovnog stanja dvodimenzionalne rešetke ima ekstremnu vrednost $|H|_{ext} = N \frac{M_B S^2}{\alpha^3}$ ako je $\varphi = \pm \frac{\pi}{2}$ i Θ proizvoljno, što znači da spinovi moraju ležati u ravni rešetke (vidi sliku 2) ali im je pravac u toj ravni proizvoljan. I u ovom slučaju se vidi da je ekstremna vrednost energije osnovnog stanja njena maksimalna vrednost ako u formuli (III.1.1) ispred sume stoji znak minus, te i ovde treba redefinisati hamiltonijan promenom znaka u (III.1.1).

Na kraju, posmatraćemo trodimenzionalnu kubnu rešetku (vidi sliku 3)



st 3

Ponavljajući račune i rezonovanja od prethodna dva slučaja, dolazimo do rezultata.

$$H = -3N \frac{M_B^2 S^2}{\alpha^3} (1 - \cos^2 \varphi \sin^2 \Theta - \sin^2 \varphi \sin^2 \Theta - \cos^2 \Theta) = 0$$

(III.1.10)

Što je potvrda poznate činjenice da je dipol-dipolna interakcija ravna nuli u kristalima kubne simetrije. Mi smo ove demonstrirali za prostu kubnu rešetku, a na vrlo sličan način dokaz možemo izvesti i za prostorno centriranu rešetku kao i za površinski centriranu rešetku. Na kraju treba reći da u trodimenzionalnim kristalnim strukturama energija osnovnog

stanja i kada nije ravna nuli ne zavisi od pravca spina (ovo smo demonstrirali za jedan poseban slučaj, formula (III.1.10), ali zaključak važi generalno). Zbog toga za trodimenzionalne strukture možemo koristiti formulu Holčajna i Primakova (III.1.1.) bez promene znaka koja je kao što smo videli bila neophodna u slučaju jedno i dvodimenzionalne strukture.

Na kraju ovog paragrafa treba reći da se mnogo češće u literaturi rasmatraju feromagnetični sa izmenskim i dipolnim interakcijama nego feromagnetični sa čisto dipolnim interakcijama. Zbog toga se u istraživanjima formula (III.1.1) dopunjava delom koji odgovara izmenskim interakcijama i računa sa hamiltonijanom

$$H = -\frac{1}{2} \sum_{f\bar{g}} [(J_{f\bar{g}} + D_{f\bar{g}}) S_f S_{\bar{g}} - 3D_{f\bar{g}} (\bar{E}_{f\bar{g}} - S_f)(\bar{E}_{f\bar{g}} S_{\bar{g}})]$$

(III.1.11)

U formuli (III.1.11) $J_{f\bar{g}}$ su integrali izmene.

2. Stabilizacija sistema

Kao što smo videli u prethodnom paragrafu hamiltonijan sistema spinova između kojih vladaju i dipolne i izmenske sile, može da se zapise u obliku

$$H_{sp} = -\mu_B H \sum_f S_f^z - \frac{1}{2} \sum_{f\bar{g}} J_{f\bar{g}} S_f S_{\bar{g}} - \frac{1}{2} \sum_{f\bar{g}} D_{f\bar{g}} [S_f S_{\bar{g}} - 3(\bar{E}_{f\bar{g}} S_f)(\bar{E}_{f\bar{g}} S_{\bar{g}})]$$

(III.2.1)

gde je

$$D_{f\bar{g}} = \frac{\mu_B}{|f-\bar{g}|^3} \quad i \quad \bar{E}_{f\bar{g}} = \frac{\bar{f} - \bar{g}}{|f - \bar{g}|}$$

Mada su dipol-dipolne sile koje su karakterisane veličinom \mathcal{D} za dva do tri reda veličina manje od ismenskih sila koje karakteriše veličina J , one na takav način ulaze u hamiltonijan (III.2.1), da se ne mogu neposredno tretirati metodom teorije perturbacije. Da bismo uprostili račun, ograničimo se na slučaj spina $S = \frac{1}{2}$ kada spinski operatori postaju Pauli operatori $S^+ = Q, (\frac{1}{2} - S^z) = Q^+Q$. Tada hamiltonijan (III.2.1) prelazi u

$$\begin{aligned}
 H_{NP} = & -\frac{1}{2} N \left\{ \mu_B \mathcal{H} + \frac{1}{4} (J_0 + \mathcal{D}_0) - \frac{3}{4} \sum_{\bar{g}} \mathcal{D}_{0\bar{g}} (\bar{E}_{0\bar{g}}^*) \right\} + \\
 & + \frac{3}{4} \sum_{\bar{f}} (\tilde{L}_0 Q_{\bar{f}}^* + \tilde{L}_0 Q_{\bar{f}}) + \tilde{A} \sum_{\bar{f}} Q_{\bar{f}}^* Q_{\bar{f}} - \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}\bar{g}} \tilde{B}_{\bar{f}\bar{g}} Q_{\bar{f}} Q_{\bar{g}} + \\
 & + \frac{1}{4} \sum_{\bar{f}\bar{g}} (\tilde{C}_{\bar{f}\bar{g}} Q_{\bar{f}}^* Q_{\bar{g}}^* + \tilde{C}_{\bar{f}\bar{g}} Q_{\bar{g}} Q_{\bar{f}}) - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}\bar{g}} (\tilde{D}_{\bar{f}\bar{g}} Q_{\bar{f}}^* Q_{\bar{g}} Q_{\bar{g}} + \tilde{D}_{\bar{f}\bar{g}} Q_{\bar{g}}^* Q_{\bar{g}} Q_{\bar{f}}) - \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}\bar{g}} \tilde{E}_{\bar{f}\bar{g}} Q_{\bar{f}}^* Q_{\bar{f}} Q_{\bar{g}}^* Q_{\bar{g}}
 \end{aligned} \tag{III.2.2}$$

U poslednjoj formuli N je broj atoma u kristalu, a ostale oznake su sledeće:

$$J_0 = \sum_{\bar{g}} J_{0\bar{g}}$$

$$\mathcal{D}_0 = \sum_{\bar{g}} \mathcal{D}_{0\bar{g}}$$

$$\tilde{L}_0 = \sum_{\bar{g}} \mathcal{D}_{0\bar{g}} E_{0\bar{g}}^* (\bar{E}_{0\bar{g}}^* + i \bar{E}_{0\bar{g}}) \quad ; \quad \tilde{A} = \mu_B \mathcal{H} + \frac{1}{2} (J_0 + \mathcal{D}_0) - \frac{3}{2} \sum_{\bar{g}} \mathcal{D}_{0\bar{g}} (\bar{E}_{0\bar{g}}^*)^2$$

$$\tilde{B}_{\bar{f}\bar{g}} = J_{\bar{f}\bar{g}} + \mathcal{D}_{\bar{f}\bar{g}} - \frac{3}{2} \mathcal{D}_{\bar{f}\bar{g}} [(\bar{E}_{\bar{f}\bar{g}}^*)^2 + (\bar{E}_{\bar{f}\bar{g}})^2]$$

$$\tilde{C}_{\bar{q}} = \frac{3}{2} \mathcal{D}_{\bar{q}\bar{q}} [(\Theta_{\bar{q}\bar{q}}^*)^2 - (\Theta_{\bar{q}\bar{q}}^{\#})^2 + 2i\Theta_{\bar{q}\bar{q}}^* \Theta_{\bar{q}\bar{q}}^{\#}]$$

$$\tilde{D}_{\bar{q}} = 3\mathcal{D}_{\bar{q}\bar{q}} \Theta_{\bar{q}\bar{q}}^* (\Theta_{\bar{q}\bar{q}}^{\#} + i\Theta_{\bar{q}\bar{q}}^*)$$

$$\tilde{E}_{\bar{q}} = J_{\bar{q}\bar{q}} + \mathcal{D}_{\bar{q}\bar{q}} - 3\mathcal{D}_{\bar{q}\bar{q}} (\Theta_{\bar{q}\bar{q}}^*)^2$$

(III.2.3)

Da bismo mogli da vršimo dalje analize sistema, neophodno je iz hamiltonijana (III.2.2) eliminisati članove koji su linearni po operatorima Q i Q^+ jer prisustvo ovih članova označava nepravilno izabranu osu kvantizacije sistema. Eliminaciju ovih članova izvršićemo koristeći kanoničnu transformaciju,

$$Q^+ = -\alpha\beta(1-2P^+P) + \alpha^2 P^+ - \beta^2 P$$

$$\begin{aligned} Q^+ &= |\beta|^2 - \alpha\beta P^+ - \beta\bar{\beta}P + (\alpha^2 - |\beta|^2)P^+P \\ &\quad |\alpha|^2 + |\beta|^2 = 1 \end{aligned} \tag{III.2.4}$$

kojom se od Pauli operatora Q i Q^+ prelazi na nove Pauli operatore P i P^+ . Posle zamene (III.2.4) u (III.2.2) novodobijeni hamiltonijan sistema sredi se po formulama rastućeg stepena po operatorima P i P^+ . Stabilizacija sistema tj. pravilan izbor osse kvantizacije postiže se tako što se koeficijent uz linearu formu po P izjednači sa nulom. Ovaj uslov svodi se na

$$\begin{aligned} &3\alpha^2(1-4|\beta|^2)\tilde{L}_o - 3\beta^2[1-2(|\alpha|^2 - |\beta|^2)]\tilde{L}_o^* - \\ &- 2\alpha\beta[2\tilde{A} - (|\alpha|^2 - |\beta|^2)\tilde{B}_o - 2|\beta|^2\tilde{E}_o] - \\ &- 2\alpha^3\beta\tilde{C}_o + 2\alpha^2\beta^2\tilde{C}_o^* = 0 \end{aligned} \tag{III.2.5}$$

gde je

$$\tilde{B}_o = \sum_{\bar{g}} \tilde{B}_{o\bar{g}} \quad ; \quad \tilde{C}_o = \sum_{\bar{g}} \tilde{C}_{o\bar{g}}$$

$$\tilde{E}_o = \sum_{\bar{g}} \tilde{E}_{o\bar{g}}$$

Ako uvedemo označke $\alpha = xe^{ai}$ i $\beta = ye^{bi}$ onda se uslov (III.2.5) svodi na sledeći sistem jednačina:

$$b_1 = 4\tilde{C}_o^2$$

$$b_2 = 144\tilde{L}_o^2 + 16\tilde{C}_o\tilde{E}_o - 16\tilde{C}_o\tilde{B}_o$$

$$b_3 = 288|\tilde{L}_o|^2 + 8|\tilde{C}_o|^2 + 16\tilde{E}_o^2 + 16\tilde{B}_o^2 - 32\tilde{E}_o\tilde{B}_o$$

$$b_4 = 144\tilde{L}_o^2 + 16\tilde{C}_o\tilde{E}_o - 16\tilde{C}_o\tilde{B}_o$$

$$b_5 = 4\tilde{C}_o^2$$

$$b_6 = -4\tilde{C}_o^2$$

$$b_7 = -216\tilde{L}_o^2 + 16\tilde{A}\tilde{C}_o + 24\tilde{B}_o\tilde{C}_o - 32\tilde{C}_o\tilde{E}_o$$

$$b_8 = -576|\tilde{L}_o|^2 + 32\tilde{A}\tilde{E}_o - 32\tilde{A}\tilde{B}_o + 80\tilde{B}_o\tilde{E}_o - 32\tilde{B}_o^2 - 16|\tilde{C}_o|^2 - 48\tilde{E}_o^2$$

$$b_9 = -360\tilde{L}_o^2 + 16\tilde{A}\tilde{C}_o + 40\tilde{B}_o\tilde{C}_o - 48\tilde{E}_o\tilde{C}_o$$

$$b_{10} = -12\tilde{C}_o^2$$

$$b_{11} = 81\tilde{L}_o^2 - 16\tilde{A}\tilde{C}_o - 8\tilde{B}_o\tilde{C}_o + 16\tilde{C}_o\tilde{E}_o$$

$$b_{12} = 342|\tilde{L}_o|^2 - 64\tilde{A}\tilde{E}_o + 48\tilde{A}\tilde{B}_o - 64\tilde{B}_o\tilde{E}_o + 8|\tilde{C}_o|^2 + 48\tilde{E}_o^2 + 16\tilde{A}^2 + 20\tilde{B}_o^2$$

$$b_{13} = 297\tilde{L}_o^2 - 32\tilde{A}\tilde{C}_o - 32\tilde{B}_o\tilde{C}_o + 48\tilde{E}_o\tilde{C}_o$$

$$b_{14} = 12\tilde{C}_o^2$$

$$b_{15} = 32\tilde{A}\tilde{E}_o + 16\tilde{B}_o\tilde{E}_o - 16\tilde{A}\tilde{B}_o - 16\tilde{A}^2 - 16\tilde{E}_o^2 - 4\tilde{B}_o^2 - 54|\tilde{L}_o|^2$$

$$b_{16} = 16\tilde{A}\tilde{C}_o + 8\tilde{B}_o\tilde{C}_o - 16\tilde{C}_o\tilde{E}_o - 90\tilde{L}_o^2$$

$$b_{17} = -4\tilde{C}_o^2$$

$$b_{18} = 9\tilde{L}_o^2$$

$$b_i = b'_i + i b''_i \quad \text{za } i = (1, 2, 3, \dots, 18) \quad (\text{III.2.6})$$

$$\text{gde je } z = x^2 \quad ; \quad t = \cos 2(\alpha - \beta)$$

Koeficijenti u jednačinama (III.2.6) računati su za trikliničnu kristalnu strukturu sa parametrima $a = 4 \text{ \AA}$, $b = 5 \text{ \AA}$, $c = 6 \text{ \AA}$, $\alpha = 30^\circ$, $\beta = 45^\circ$ i $\gamma = 60^\circ$. Takodje je uzeto

$$J_0 = 9,02 \cdot 10^{-15} \text{ erg.}, \mathcal{D}_0 = 0,70 \cdot 10^{-15} \text{ erg. i } A(\mathcal{H}=0) = 8,65 \cdot 10^{-15} \text{ erg.}$$

Kao što se vidi spoljašnje magnetno polje je prisutno, a integrali izmene su uzeti tako da po redu veličine odgovaraju lanđanidskim feromagneticima.

Sistem jednačina rešavan je na računaru IBM sistema 360/44 na PMF u Beogradu i dobijeni su rezultati

$$\alpha = 0,85 e^{i\frac{\Theta}{10}} \quad ; \quad \beta = 0,53$$

(III.2.7)

Koristeći dobijene rezultate i opštu vezu izmedju spinora i tensora iz [1] strana 246 formula (58.10) dolazimo do zaključka da se za gornji izbor parametara posmatrani sistem stabilizuje rotacijom za sledeće Ojlerove uglove: $\Theta \approx 64^\circ$, $\varphi = 108^\circ$ i $\psi = -72^\circ$. Pošto ugao Θ određuje pravac nove ose kvantizacije, to znači da osu kvantizacije sistema sa hamiltonijonom (III.2.2) treba rotirati za 64° da bi se postiglo stabilno osnovno stanje.

3. Analiza sistema na niskim temperaturama

Posle stabilizacione temperature koja je izvršena u prethodnom paragrafu, hamiltonijan (III.2.2) može se napisati u obliku,

$$\begin{aligned} H_{HP} = & H_0 + A \sum_f R_f^+ R_f - \frac{1}{2} \sum_{f\bar{g}} B_{\bar{f}\bar{g}} R_f^+ R_{\bar{g}} + \\ & + \frac{1}{4} \sum_{\bar{f}\bar{g}} (C_{\bar{f}\bar{g}} R_f^+ R_{\bar{g}}^+ + \tilde{C}_{\bar{f}\bar{g}} R_{\bar{g}} R_f) - \\ & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}\bar{g}} (D_{\bar{f}\bar{g}} R_{\bar{f}}^+ R_{\bar{g}}^+ + \tilde{D}_{\bar{f}\bar{g}} R_{\bar{g}}^+ R_{\bar{f}}) - \frac{1}{2} \sum_{\bar{f}\bar{g}} E_{\bar{f}\bar{g}} R_f^+ R_{\bar{f}} R_{\bar{g}}^+ R_{\bar{g}} \end{aligned} \quad (\text{III.3.1})$$

Koefficijenti $A_{\alpha\beta}$ konstruisani su preko $\tilde{A}_{\alpha\beta}$ i $\tilde{\alpha}_\beta$ koji su dati formulem (III.2.7). Izrazi za ove koefficijente veoma su glomazni, a procedura njihovog iznalaženja je prosta, pa njihov eksplicitni oblik nećemo navoditi. Tim pre, što dalju numeričku analizu nećemo vršiti. U ovoj fazi analize se kao problem pojavljuje eliminacija članova koji ne održavaju broj kvazi čestica, a to je deo izraza (III.3.1) koji je proporcionalan P^+P i PP . Eliminaciju ovih članova izvršićemo koristeći Vajlov identitet

$$H_{\text{eq}} = e^{-S} H_{HP} e^S \approx H_{HP} - [S, H_{HP}] + \frac{1}{2} [S, [S, H_{HP}]] \quad (\text{III.3.2})$$

gde je

$$S = \sum_{\bar{n}\bar{m}} (X_{\bar{n}\bar{m}} R_{\bar{n}} + Y_{\bar{n}\bar{m}} R_{\bar{m}} R_{\bar{n}}) - CC \quad (\text{III.3.3})$$

Važno je naglasiti, da je prisustvo člana linearne po P u formuli (III.3.3) neophodno zbog toga što komutator $[H, PP]$ sadrži linearne članove po P . Funkcija X služi zato da bi se ovi članovi eliminisali. Sa tačnošću do kvadrata dipolnog i izmenskog potencijala $(\frac{Q_0}{J_0})^2$ zaključno funkcije Y i X mogu se pisati,

$$Y_{\bar{K}} = \left(\frac{C'_{\bar{K}}}{4\Delta_{\bar{K}}} + \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} \frac{E_{\bar{K}-\bar{g}} C'_{\bar{g}}}{4\Delta_{\bar{K}} \Delta_{\bar{g}}} \right) + i \left(\frac{-C''_{\bar{K}}}{4\Delta_{\bar{K}}} - \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} \frac{E_{\bar{K}-\bar{g}} C''_{\bar{g}}}{4\Delta_{\bar{K}} \Delta_{\bar{g}}} \right)$$

$$Y_{\bar{K}} = \sum Y_{0\bar{n}} e^{i\bar{K}\bar{n}} ; \quad X_0 = \frac{1}{N} \sum_{\bar{g}} \frac{D'_{\bar{g}} C'_{\bar{g}} + D''_{\bar{g}} C''_{\bar{g}}}{2\Delta_0 \Delta_{\bar{g}}} - \frac{i}{N} \sum_{\bar{g}} \frac{D'_{\bar{g}} C''_{\bar{g}} - D''_{\bar{g}} C'_{\bar{g}}}{2\Delta_0 \Delta_{\bar{g}}}$$

$$X_0 = \sum_{\bar{n}} X_{0\bar{n}} ; \quad \Delta_{\bar{K}} = 2A - B_{\bar{K}} ; \quad (\text{III.3.4})$$

$$C_{\bar{K}} = \sum_{\bar{n}} C_{0\bar{n}} e^{-i\bar{K}\bar{n}} = C'_{\bar{K}} + iC''_{\bar{K}} ; \quad D_{\bar{K}} = \sum_{\bar{n}} D_{0\bar{n}} e^{-i\bar{K}\bar{n}} = D'_{\bar{K}} + iD''_{\bar{K}}$$

$$B_{\bar{K}} = \sum_{\bar{n}} B_{0\bar{n}} e^{-i\bar{K}\bar{n}} ; \quad E_{\bar{K}} = \sum_{\bar{n}} E_{0\bar{n}} e^{-i\bar{K}\bar{n}}$$

Hamiltonijan (III.3.1) postaje,

$$H = E_0 \sum_f R_f^+ R_f + \frac{1}{2} \sum_{fg} T_{fg} R_f^+ R_g + \frac{1}{2} \sum_{fg} W_{fg} R_f^+ R_f R_g^+ R_g \quad (\text{III.3.5})$$

gde je

$$E_0 = A - 8N^{-1} \sum_{\bar{g}} |\Delta_{\bar{g}}| |Y_{\bar{g}}|^2 + 8N^{-2} \sum_{\bar{g}\bar{g}'} E_{\bar{g}-\bar{g}'} Y_{\bar{g}}^* Y_{\bar{g}'} + \\ + 4N^{-1} \sum_{\bar{g}} [R_e(Y_{\bar{g}} C_{\bar{g}}) + R_e(X_0 D_0)] ; \quad T_{fg} = N^{-1} \sum_{\bar{K}} Y_{\bar{K}} e^{i\bar{K}(f-\bar{g})}$$

$$Y_{\bar{K}} = -\frac{1}{2} B_{\bar{K}} + 4\Delta_{\bar{K}} |Y_{\bar{K}}|^2 - 2R_e(Y_{\bar{K}} C_{\bar{K}}) + R_e(X_0 D_{\bar{K}})$$

$$W_{fg} = -E_{fg} - 4(Y_{fg} C_{fg} + \dot{Y}_{fg} \dot{C}_{fg}) + 32A |Y_{fg}|^2 - 16E_{fg} |Y_{fg}|^2 - \\ - 8 \sum (Y_{fg} Y_{\bar{f}\bar{g}} + Y_{\bar{f}\bar{g}} Y_{\bar{f}g}) B_{\bar{f}\bar{g}} \quad (\text{III.3.6})$$

117.2.5

i tek sada je moguće analizirati sistem nekim od perturbacionih metoda. Napominjeno, da su u (III.3.5) ispušteni članovi tipa $P^+PPP + C.C.$ što znači da ćemo se u analizi ograničiti na prvu aproksimaciju teorije perturbacije. Takođe treba nglasiti da cela procedura regulisanja problema neodržanja može da se izvede zahvaljujući prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja. Ukoliko bi ovo polje bilo ravno nuli, onda bi procedura mogla da se vrši samo u domenu velikih talasnih vektora $K > \frac{q}{4a}$ gde je (a) konstanta magnetne rešetke. Slučaj malih talasnih vektora i odsustvo spoljašnjeg magnetnog polja ne mogu se uklopiti u gornju šemu i na žalost za ovaj slučaj nije mogao biti nadjen neki korekten teorijski tretman. Za ovaj slučaj ostalo bi da se rešava problem metodom U-V transformacijom Bogoliubljeve koji je, kao što smo napomenuli u uvođu, samo delimično tačan.

Termodinamičku analizu sistema sa hamiltonijanom (III.3.5) izvršićemo pomoću Grinove funkcije $\tilde{\Gamma}_{f\bar{g}} = \langle\langle R_f | R_{\bar{g}}^+ \rangle\rangle$. Koristeći standardnu tehniku dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina za funkciju $\tilde{\Gamma}$, dobijamo sledeću jednačinu:

$$(E - E_0) \tilde{\Gamma}_{f\bar{g}}(E) = \frac{iG}{2\eta} \delta_{f\bar{g}} + \frac{1}{2} \sum_m T_{f\bar{m}} \tilde{\Gamma}_{\bar{m}\bar{g}}(E) -$$

$$- \sum_{\bar{m}} T_{f\bar{m}} \langle\langle R_f^+ R_{\bar{m}} | R_{\bar{g}}^+ \rangle\rangle_E +$$

$$+ \sum_{\bar{m}} w_{f\bar{m}} \langle\langle R_{\bar{m}}^+ R_{\bar{m}} | R_{\bar{g}}^+ \rangle\rangle_E$$

$$G = 1 - 2 \langle R_f^+ R_f \rangle$$

Koristeći formule za prelazak od Pauli operatora na Boze operatora,

$$P = \left[\sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} b^{\dagger}_{\nu} b^{\nu} \right]^{\frac{1}{2}} \approx b - b^{\dagger} b$$

$$PP^{\dagger} = \sum_{\nu=0}^{\infty} \frac{(-2)^{\nu}}{(1+\nu)!} b^{\dagger}_{\nu+1} b^{\nu+1} \approx b^{\dagger} b - b^{\dagger} b b$$

(III.3.8)

i proceduru dekuplovanja u kojoj se koristi Vikova teorema za Boze operatora (sparivanje se vrši samo po istom vremenu)

$$\langle R_m^{\dagger} R_m R_f | R_g \rangle = C_f^{(0)} G_{f-g}(E) + M_{f-m}^2 G_{m-g}(E)$$

$$M_{f-m}^2 = \langle b_m^{\dagger} b_f \rangle_0$$

(III.3.9)

i konačno dobijamo

$$G_K(E) = \frac{1 + 2C_f^{(0)}}{E - \Omega_K} ; \quad \Omega_K = \varepsilon_K - N^{-1} \sum_{\bar{q}} (T_{\bar{q}} + T_{\bar{q}} - w_0 - w_{K-\bar{q}}) \langle b_{\bar{q}}^{\dagger} b_{\bar{q}} \rangle$$

$$G_K(E) = \sum_{\bar{n}} G_{\bar{n}}(E) e^{-iE\bar{n}} ; \quad \varepsilon_K = \varepsilon_0 + \gamma_K$$

$$\langle b_{\bar{q}}^{\dagger} b_{\bar{q}} \rangle_0 = (e^{\frac{\varepsilon_K}{\theta}} - 1)^{-1} ; \quad C_f^{(0)} = N^{-1} \sum_{\bar{q}} \langle b_{\bar{q}}^{\dagger} b_{\bar{q}} \rangle$$

$$T_K = \sum_{\bar{n}} T_{0\bar{n}} e^{-iE\bar{n}} ; \quad w_K = \sum_{\bar{n}} w_{0\bar{n}} e^{-iE\bar{n}}$$

(III.3.10)

Ponašanje magnetizacije na niskim temperaturama može se izraziti na sledeći način

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= 1 - 2 \langle b_F^+ b_F \rangle_0 + 4 \langle b_F^+ b_F \rangle_0^2 = \\ &= 1 - 2 N^{-1} \sum_{\vec{k}} (e^{\frac{\Omega_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1)^{-1} - \\ &\quad - 4 C_F^{(0)} N^{-1} \sum_{\vec{k}} (e^{\frac{\Omega_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1)^{-1} + 4 \langle b_F^+ b_F \rangle_0^2 \end{aligned}$$

tako da konačno dobijamo

$$\mathcal{G} = 1 - 2 N^{-1} \sum_{\vec{k}} (e^{\frac{\Omega_{\vec{k}}}{\Theta}} - 1)^{-1} \quad (\text{III.3.11})$$

Koristeći aproksimaciju efektivne mase (koja se u ovom slučaju uzima kao skalar) na osnovu (III.3.11) dolazimo do rezultata

$$\begin{aligned} \mathcal{G} &= 1 - 2 V_0 \left(\frac{m}{2 \Omega \pi^2} \right)^{\frac{3}{2}} Z_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\varepsilon_0}{\Theta} \right) \Theta^{\frac{3}{2}} + \\ &\quad + 2 V_0^2 \left(\frac{m}{2 \Omega \pi^2} \right)^3 |V_0 - T_0| Z_{\frac{1}{2}} \left(\frac{\varepsilon_0}{\Theta} \right) Z_{\frac{3}{2}} \left(\frac{\varepsilon_0}{\Theta} \right) \Theta^2 \end{aligned} \quad (\text{III.3.12})$$

gde je V_0 zapremina elementarne magnetne čelije i

$$Z_p(x) = \sum_{n=1}^{\infty} e^{-xn} n^{-p}$$

Kao što vidimo, treći član u formuli (III.3.12) pojavljuje se usled anharmonijskih efekata i proporcionalan je kvadru temperatu. Ovde treba ukazati na razliku koja nastaje u odnosu na čist izmenski feromagnetik, gde je prva anharmonijska popravka proporcionalna četvrtom stepenu absolutne temperature. Treba naglasiti, da ova razlika nije posledica nepravilnosti dekuplovanja (III.3.9), jer bi ono za čist izmenski feromagnetik dalo tačno Dajsonov rezultat. Razlog za pojavu

člana proporcionalnog Θ^2 je činjenica da matrični elementi W_0 i T_0 nisu međusobno jednaki, pa je i razlika $W_0 - T_0$ različita od nule. U čistom izmenskom feromagnetiku ova razlika je ravna nuli i to vodi na popravku proporcionalnu Θ^4 . Pošto se W_0 i T_0 razlikuju upravo za veličinu dipolnih potencijala to možemo zaključiti da je osnovni efekat prisustvo dipolnih sila na niskim temperaturama pojava anharmonijske korekcije u magnetizaciji koja je proporcionalna kvadratu temperature. Ovo istovremeno označava da prisustvo dipolnih sila čini magnetizaciju "tvrdjom" tj. ona sporije opada sa porastom temperature nego u odgovarajućem feromagnetiku sa čistim izmenskim silama.

4. Uticaj dipolnih sila na veličinu kritične temperature i multičestični procesi

Prilikom visokotemperaturske analize koristićemo hamiltonijan (III.3.5) i jednačinu (III.3.7) za Grinovu funkciju. Dekuplovanje viših Grinovih funkcija vršićemo po metodu hao-tičnih faza tj.

$$\langle R_f^+ R_R | R_g^+ \rangle_e \approx \frac{1-\Theta}{2} \Gamma_{\bar{n}-\bar{g}}(E)$$

$$\langle R_{\bar{n}}^+ R_R | R_g^+ \rangle \approx \frac{1-\Theta}{2} \Gamma_{\bar{f}-\bar{g}}(E)$$

(III.4.1)

Zamenom (III.4.1) u (III.3.7) dobijamo sledeći izraz za Grinovu funkciju

$$\Gamma_{\bar{k}}(E) = \frac{i}{2\Re} \frac{\Theta}{E - F_{\bar{k}}}$$

(III.4.2)

gde je

$$\Gamma_{\bar{k}}(E) = \sum_{\bar{n}} \Gamma_{\bar{n}}(E) e^{-i\bar{k}\bar{n}}$$

$$F_{\bar{k}} = E_0 + \frac{1}{2} W_0 - \frac{\Theta}{2} (W_0 - T_{\bar{k}})$$

(III.4.3)

Koristeći spektralnu intenzivnost Grinove funkcije $\Gamma_{\bar{k}}(E)$ za magnetizaciju dobijamo sledeći izraz:

$$\mathcal{G} = N^{-1} \sum_{\bar{k}} \operatorname{ctgh} \left(\frac{R}{2\Theta} + \frac{\mathcal{G} D_{\bar{k}}}{2\Theta} \right)$$

(III.4.4)

gde je

$$R = \mathcal{E}_0 + \frac{1}{2} \omega_0 \quad i \quad D_{\bar{k}} = \frac{1}{2} (\omega_0 - T_{\bar{k}})$$

(III.4.5)

Analizu kritične temperature ne možemo izvršiti na standardan način analizirajući ponašanje magnetne susceptibilnosti u paramagnetskoj fazi, zato što je ovakva analiza stremljene spoljašnjeg magnetskog polja ka nuli, a kao što znamo iz prethodnog paragrafa hamiltonijan (III.3.5) dobijen je uz pretpostavku da je spoljašnje polje različito od nule. Zbog toga ćemo ići drugim putem. Izraz za magnetizaciju (III.4.4) razvivimo u red smatrajući da je \mathcal{G} blisko nuli u feromagnetskoj fazi blizu tačke prelaza, naći ćemo izvod magnetizacije po temperaturi i kao kritičnu temperaturu definisati ovu vrednost Θ za koju $\frac{\partial \mathcal{G}}{\partial \Theta}$ postaje beskonačno.

Razvoj magnetizacije daje sledeći izraz,

$$\mathcal{G} \approx \frac{\Theta}{\omega_0} \operatorname{sh} \frac{R}{\Theta} \pm \sqrt{\frac{\Theta^2}{\omega_0^2} \operatorname{sh}^2 \frac{R}{\Theta} + \frac{4\Theta}{N_0} \operatorname{sh}^2 \frac{R}{\Theta}}$$

(III.4.6)

$$\omega_0 < 0 \equiv |\omega_0|$$

i odavde lako zaključujemo da je kritična temperatura $\Theta_c \approx \frac{1}{2} |\omega_0|$. Treba samo naglasiti da temperatura Θ_c , definisana na ovaj način, ne postoji uvek, već samo ako je $|\omega_0| > \mathcal{E}_0$. Ukoliko ova uslov nije zadovoljen, to znači da u sistemu ne nastupa fazni prelaz druge vrste, nego najverovatnije fazni prelaz prve vrste. Dobijeni rezultat pokazuje da prisustvo dipolnih interakcija povišava kritičnu temperaturu u odnosu na čist izmenski feromagnet, što se i moglo očekivati s obzirom na rezultate prethodnog paragrafa, gde smo konstatovali da prisustvo

dipolnih sila dovodi do sporijeg opadanja magnetizacije sa porastom temperature.

Na kraju, ispitivaćemo mogućnost fuzije i raspadanja kvazi-čestica u sistemu sa izmenskim i dipolnim interakcijama. Za ove procese odgovorni su oni delovi kompletног hamiltonijana sistema koje nismo uzeli u obzir prilikom termodinamičke analize, a to su,

$$H_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{2} \sum_{\vec{q}} \tilde{D}_{\vec{q}} P_{\vec{q}}^{\dagger} P_{\vec{q}} + CC = -\frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} \tilde{D}_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2}^{\dagger} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_2} + CC$$

(III.4.7)

i

$$\begin{aligned} H_{3 \rightarrow 1} &= 2 \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2} (Y_{\vec{q}_1} E_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_1}^{\dagger} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_2}^{\dagger} - Y_{\vec{q}_2} B_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_2}^{\dagger} P_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_1}^{\dagger}) + CC = \\ &= 2N \sum_{\vec{q}_1 \vec{q}_2 \vec{q}_3} Y_{\vec{q}_1} (E_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2} - B_{\vec{q}_2}) P_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2 + \vec{q}_3}^{\dagger} P_{\vec{q}_1} P_{\vec{q}_2} P_{\vec{q}_3} + CC \end{aligned}$$

(III.4.8)

Napominjemo, da se $H_{3 \rightarrow 1}$ pojavilo u računu kao rezultat eliminacije neodržanja.

Pomoću hamiltonijana $H_{2 \rightarrow 1}$ analiziraćemo proces fuzije dve kvazičestice u jednu, tj. prelaz iz stanja

$$|i\rangle = |0_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2}\rangle |n_{\vec{q}_1}\rangle |n_{\vec{q}_2}\rangle$$

u stanje

$$\langle f | = \langle 1_{\vec{q}_1 + \vec{q}_2} | \langle n_{\vec{q}_1} - 1 | \langle n_{\vec{q}_2} - 1 |$$

Verovatnoća fuzije dobija se standardnom primenom teorije perturbacije i iznosi

$$W_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{4} |D_{\bar{q}_1}|^2 \frac{n_{\bar{q}_1}}{N} n_{\bar{q}_2} \quad (\text{III.4.9})$$

gde su $n_{\bar{q}_1}$ i $n_{\bar{q}_2}$ brojevi kvazičestica u inicijalnom stanju. Pošto u ovom prelazu mora da važi zakon o održanju energije $E_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2} = E_{\bar{q}_1} + E_{\bar{q}_2}$ to lako zaključujemo da su procesi fuzije mogući za uglove između 0 i $\frac{\pi}{2}$. Ako uzmemo da je $D \sim 10^{-15}$ erg. $n_{\bar{q}_1} = n_{\bar{q}_2} = n = 10^2$ tada

$$W_{2 \rightarrow 1} = \frac{1}{4} |D|^2 \frac{n}{N} n \sim 10^{-15} \quad (\text{III.4.10})$$

sto znači da na 10^{15} sudarnih processa imamo jedan proces fuzije dve kvazičestice u jednu.

Analognom analizom možemo izvršiti i za proces fuzije tri kvazičestice u jednu. Analiziraćemo prelaz iz inicijalnog stanja

$$|i\rangle = |0_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2 + \bar{q}_3}\rangle |n_{\bar{q}_1}\rangle |n_{\bar{q}_2}\rangle |n_{\bar{q}_3}\rangle$$

$$\langle f | = |1_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2 + \bar{q}_3}\rangle |n_{\bar{q}_1} - 1_{\bar{q}_1}\rangle |n_{\bar{q}_2} - 1_{\bar{q}_2}\rangle |n_{\bar{q}_3} - 1_{\bar{q}_3}\rangle$$

pod dejstvom hamiltonijana $H_{3 \rightarrow 1}$. Na isti način kao i u prethodnom slučaju nalazimo da je verovatnoća

$$W_{3 \rightarrow 1} = 4 |Y_{\bar{q}_1} (E_{\bar{q}_1 + \bar{q}_2} - B_{\bar{q}_3})|^2 \frac{n_{\bar{q}_1} n_{\bar{q}_2}}{N^2} n_{\bar{q}_3} \quad (\text{III.4.11})$$

a zakon konzervacije energije $\mathcal{E}_{\bar{\varrho}_1+\bar{\varrho}_2+\bar{\varrho}_3} = \mathcal{E}_{\bar{\varrho}_1} + \mathcal{E}_{\bar{\varrho}_2} + \mathcal{E}_{\bar{\varrho}_3}$ pokazuje da je proces fuzije moguć u uglovnim intervalima

$$\Theta_{23} \in (0, \pi)$$

$$\Theta_{12} \in (\arccos \frac{K_0^2}{q_1 q_2}, \pi)$$

$$\Theta_{13} \in [0, \arccos(\frac{q_2}{q_1} \cos \Theta_{23})]$$

gde je $K_0 = \frac{2m\mathcal{E}_0}{\hbar^2}$. Ako uzmemo da je $\Delta q \sim 10^{-14}$ erg, i $n_{\bar{\varrho}_1} = n_{\bar{\varrho}_2} = n_{\bar{\varrho}_3} = M = 10^{-2}$
i $|E - B|, |C| \sim 10^{-15}$ erg dobijamo

$$W_{3 \rightarrow 1} = \frac{1}{4} \left| \frac{C|E-B|}{\Delta} \right|^2 \left| \frac{n}{N} \right|^2 n \sim 10^{-21}$$

(III.4.12)

Kao što vidimo, proces fuzije tri kvazičestice u jednu je oko 10^6 puta manje verovatan nego proces fuzije dve kvazičestice u jednu pri istim uslovima (ista koncentracija kvazičestica).

Na kraju napomenimo, da je materijal 2,3 i 4 paragrafa ove glave izložen na osnovu radova [63, 64].

IV G L A V A

UTICAJ PONONA NA KINEMATIČKE NIVOJE
U FEROMAGNETIKU

1. Jednačina za Grinovu funkciju u prisustvu fononskog polja

Spinski talasi i fononi su kvazičestice koje imaju približno istu energiju, pa je zato izučavanje njihove interakcije veoma značajno. Činjenica da ove kvazičestice imaju energiju istog reda veličine znači, drugim rečima, da bilo kakva analiza čistog spinskog sistema bez uračunavanja fononskih efekata nema većeg praktičnog značaja, jer teorijski rezultat ne odgovara uslovima eksperimenta bez obzira na to koliko je visoka temperatura na kojoj se eksperiment vrši. Problemu interakcije spinskih talasa i fonona posvećeno je u literaturi mnogo pažnje. Na niskim temperaturama osnovni rezultati dati su radovima [9-16] dok su radovima [17-22] analizirane osobine sistema za ceo interval temperature od nule do temperaturе prelaza.

U ovom delu disertacije obradićemo do sada neanaliziran problem, a to je problem kako fononi utiču na kinematičke nivoe [7 8] u sistemu spinskih talasa. U drugoj glavi smo videli da kinematička interakcija spinskih talasa može bitno da utiče na magnetne karakteristike i to u oblasti velikih talasnih vektora. Naš cilj je da vidimo da li interakcija sa fononima dopušta postojanje kinematičkih nivoa i u kojim oblastima impulsa. Zbog veoma komplikovanih računa ovde ćemo analizirati samo slučaj feromagnetika sa spinom $S = \frac{1}{2}$ i na niskim temperaturama, kada se oscilacije atoma mogu smatrati malim u odnosu na konstantu magnetne rešetke. Ovi rezultati mogu da posluže kao orijentacija da li se treba upuštati u komplikovanije račune sa dopunskim nivoima, koji bi se odnosili na feromagnete sa spinom proizvoljne veličine i koja bi obuhvatala celokupnu aktuelnu temperatursku oblast za feromagnetički t. j. oblast od $T = 0$ do temperature prelaza.

U odnosu na treći paragraf prve glave ovde ćemo izvršiti redefiniciju hamiltonijana interakcije spinskih talasa i fonona, i to u smislu radova [65, 66]. Spinski hamiltonijan za $S = \frac{1}{2}$ možemo napisati u obliku

$$H_S = \frac{1}{2} \sum_{\vec{n} \vec{m}} (\alpha_{\vec{n} \vec{m}} R_{\vec{m}}^{\dagger} R_{\vec{n}} - \beta_{\vec{n} \vec{m}} R_{\vec{n}}^{\dagger} R_{\vec{m}} R_{\vec{m}}^{\dagger} R_{\vec{n}}) \quad (\text{IV.1.1})$$

gde je

$$\alpha_{\bar{n}\bar{m}} = J_{\bar{n}\bar{m}} - I_{\bar{n}\bar{m}} \quad ; \quad \beta_{\bar{n}\bar{m}} = I_{\bar{n}\bar{m}} \quad (IV.1.2)$$

Usled oscilovanja atoma $\bar{n} \rightarrow \bar{n} + \bar{u}_{\bar{n}}$ i $\bar{m} \rightarrow \bar{m} + \bar{u}_{\bar{m}}$
i u skladu sa ovim

$$\alpha_{\bar{n}\bar{m}} \rightarrow \alpha_{\bar{n}+\bar{u}_{\bar{n}}, \bar{m}+\bar{u}_{\bar{m}}} \approx \alpha_{\bar{n}\bar{m}} + (\bar{u}_{\bar{n}} - \bar{u}_{\bar{m}}) \nabla_{\bar{n}\bar{m}} \alpha_{\bar{n}\bar{m}}$$

$$\beta_{\bar{n}\bar{m}} \rightarrow \beta_{\bar{n}+\bar{u}_{\bar{n}}, \bar{m}+\bar{u}_{\bar{m}}} \approx \beta_{\bar{n}\bar{m}} + (\bar{u}_{\bar{n}} - \bar{u}_{\bar{m}}) \nabla_{\bar{n}\bar{m}} \beta_{\bar{n}\bar{m}} \quad (IV.1.3)$$

pri čemu je za dobijanje poslednjeg stava iskorišćena pretpostavka da su pomaci atoma \bar{u} mali.

Koristeći razvoje (IV.1.3) hamiltonijan sistema spin-skih talasa fononi možemo napisati u obliku

$$H = H_S + H_P + H_{SP} \quad (IV.1.4)$$

gde je H_S dato formulom (IV.1.1),

$$H_P = \sum_{\vec{q}j} \hbar \omega_{\vec{q}j} b_{\vec{q}j}^+ b_{\vec{q}j} \quad (IV.1.5)$$

$$H_{SP} = \frac{1}{2} \sum (u_{\bar{n}} - u_{\bar{m}}) \left[P_{\bar{n}}^+ P_{\bar{m}} \nabla_{\bar{n}\bar{m}} \alpha_{\bar{n}\bar{m}} - P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{n}} P_{\bar{m}}^+ P_{\bar{n}} \nabla_{\bar{n}\bar{m}} \beta_{\bar{n}\bar{m}} \right]$$

(IV.1.6)

U formuli (IV.1.5) b su fononski operatori a $\omega_{\vec{q}j} = v_j / \vec{q}$,
($q \equiv |\vec{q}|$), gde su v_j brzina zvuka za tri komponente zvučnih talasa. Atomski pomaci izražavaju se preko fononskih operatora na sledeći način,

$$\bar{u}_{\bar{n}} = \sum_{\vec{q}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}j}}} \bar{l}_{\vec{q}j} (b_{\vec{q}j} + b_{-\vec{q}j}^+) G^{i\bar{q}\bar{n}} \quad (IV.1.7)$$

gde je M masa atoma, a $\vec{I}_{\bar{q}j}$ polarizacioni fononski vektori. Redefinicija hamiltonijana interakcije sastoji se u tome, što je u funkciji $d_{\bar{n}\bar{m}}$ koja figuriše u (IV.1.6) zadržan lokalni član $J_0 d_{\bar{n}\bar{m}}$.

Analizu sistema sa hamiltonijonom (IV.1.4) izvršićemo koristeći se Grinovom funkcijom $\langle P_{\bar{\alpha}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle$. Koristeći standardnu tehniku dvostrukih temperaturskih funkcija Grina, dobijamo sledeću jednačinu

$$\begin{aligned}
 i \frac{d}{dt} \langle P_{\bar{\alpha}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle = & i d_{\bar{\alpha}\bar{\alpha}} d(t) (1 - 2N_p) + \\
 & + \frac{1}{2} J_0 \langle P_{\bar{\alpha}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle - \\
 & - \frac{1}{2} \sum_{\bar{m}} I_{\bar{\alpha}\bar{m}} \langle P_{\bar{m}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle + \\
 & + \sum_{\bar{m}} I_{\bar{\alpha}\bar{m}} \langle P_{\bar{\alpha}}^+(t) P_{\bar{\alpha}}(t) P_{\bar{m}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle - \\
 & - \sum_{\bar{m}} I_{\bar{\alpha}\bar{m}} \langle P_{\bar{m}}^+(t) P_{\bar{m}}(t) P_{\bar{\alpha}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle + \\
 & + \frac{1}{2} \sum_{\bar{m}\bar{q}\bar{j}} F_{\bar{\alpha}\bar{m}}(\bar{q}\bar{j}) \langle b_{\bar{q}\bar{j}}(t) P_{\bar{m}}(t) | P_{\bar{\delta}}^+(0) \rangle
 \end{aligned} \tag{IV.1.8}$$

U jednačini (IV.1.8) $N_p = \langle P_{\bar{\alpha}}^+ P_{\bar{\alpha}} \rangle$

$$F_{\bar{\alpha}\bar{m}}(\bar{q}\bar{j}) = \frac{i}{N} \sum \left[\frac{\hbar}{2MN\omega_{\bar{q}\bar{j}}} (\bar{k}\bar{l}_{\bar{q}\bar{j}})(J_0 - J_K) \left[e^{i\bar{\alpha}(\bar{q}+\bar{K}) - i\bar{m}\bar{K}} - \right. \right. \\
 \left. \left. - e^{i\bar{\alpha}\bar{K} + i\bar{m}(\bar{q}-\bar{K})} \right] \right] \tag{IV.1.9}$$

Napominjemo, da su prilikom formiranja jednačina (IV.1.8) izvršene neke aproksimacije, ali ćemo na njih kasnije ukazati

kada izvršimo dalje transformisanje jednačine (IV.1.8).

U jednačini (IV.1.8) preći ćemo sa Pauli operatora na Boze operatora po približnim formulama

$$R_{\bar{a}} = B_{\bar{a}} - B_{\bar{a}}^+ B_a B_a \quad ; \quad R_{\bar{b}}^+ = B_{\bar{b}}^+ - B_{\bar{b}}^+ B_{\bar{b}} B_{\bar{b}} \quad (\text{IV.1.10})$$

i paulionske funkcije Grina izraziti preko bozenskih funkcija Grina, koristeći Vikovu teoremu za bozene i sparivanja u kojima se operatori vezuju i po istim i po različitim vremenima. Funkcije koje figurišu u (IV.1.8), u skladu sa ukazanom procedurom, mogu se napisati kao

$$\langle\langle R_{\bar{a}}(t) R_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle = G_{\bar{a}\bar{b}}(t)(1-4N^2) + 2D_{\bar{a}\bar{b}}(t)G_{\bar{a}\bar{b}}^2(t) + O(N^2)$$

$$\langle\langle R_{\bar{a}}^+(t) R_{\bar{b}}(t) R_{\bar{m}}(t) | R_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle = N G_{\bar{a}\bar{b}}(t) + N_{\bar{a}\bar{b}} G_{\bar{a}\bar{b}}(t) - 2D_{\bar{a}\bar{b}}(t)G_{\bar{a}\bar{b}}(t) + O(N^2)$$

$$\langle\langle R_{\bar{m}}^+(t) R_{\bar{m}}(t) R_{\bar{b}}(t) | R_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle = N G_{\bar{a}\bar{b}}(t) + N_{\bar{a}\bar{m}} G_{\bar{a}\bar{b}}(t) -$$

$$- 2D_{\bar{a}\bar{m}}(t)G_{\bar{a}\bar{b}}(t)G_{\bar{a}\bar{b}}(t) + O(N^2)$$

$$\langle\langle b_{\bar{q}j}(t) R_{\bar{m}}(t) | R_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle = \langle\langle b_{\bar{q}j}(t) B_{\bar{m}}(t) | B_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle (1-4N) +$$

$$+ 2D_{\bar{b}\bar{m}}(t)G_{\bar{a}\bar{b}}(t) \langle\langle b_{\bar{q}j}(t) B_{\bar{m}}(t) | B_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle + O(N^2)$$

(IV.1.11)

U formulama (IV.1.11) upotrebljene su sledeće oznake:

$$G_{\bar{a}\bar{b}}(t) = \langle\langle B_{\bar{a}}(t) | B_{\bar{b}}^+(0) \rangle\rangle \quad ; \quad D_{\bar{a}\bar{b}}(t) = \langle\langle B_{\bar{a}}^+(t) | B_{\bar{b}}(0) \rangle\rangle$$

$$N = \langle B_{\bar{a}}^+ B_{\bar{a}} \rangle \approx \langle R_{\bar{a}}^+ R_{\bar{a}} \rangle \quad ; \quad N_{\bar{a}\bar{b}} = \langle B_{\bar{a}}^+ B_{\bar{b}} \rangle$$

(IV.1.12)

Ako zamenimo (IV.1.12) u (IV.1.8) i izvršimo Furije transformacije:

$$G_{\bar{a}\bar{b}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{R}} \int_{-\infty}^{\infty} dE G_{\bar{R}}(E) e^{i\bar{R}(\bar{a}-\bar{b}) - iEt}$$

$$D_{\bar{a}\bar{b}}(t) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{R}} \int_{-\infty}^{\infty} dE D_{\bar{R}}(E) e^{i\bar{R}(\bar{a}-\bar{b}) - iEt}$$

$$I_{\bar{a}\bar{b}} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{R}} J_{\bar{R}} e^{i\bar{R}(\bar{a}-\bar{b})} ; \quad \delta_{\bar{a}\bar{b}} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{R}} e^{i\bar{R}(\bar{a}-\bar{b})} ; \quad D_{\bar{R}}(-E) = G_{\bar{R}}(E)$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{iEt} ; \quad \langle\langle b(t)B(t) | B^+(0) \rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE \langle\langle bB | B^+ \rangle\rangle_E e^{-iEt}$$

(IV.1.13)

dobijamo jednačinu

$$[E - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{R}})][G_{\bar{R}}(E) + \frac{2}{N^2} \sum_{\bar{q}_1 \bar{q}_2} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 G_{\bar{q}_1}(E_1) G_{\bar{q}_2}(E_2) G_{\bar{R}-\bar{q}_1+\bar{q}_2}]$$

$$[(E - E_1 + E_2)] = \frac{i}{2\pi} (1 + 2N) + \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} [J_{\bar{R}} + J_{\bar{q}} - J_0 - J_{\bar{R}-\bar{q}}] \langle B_{\bar{q}}^+ B_{\bar{q}} \rangle G_{\bar{R}}(E) -$$

$$- \frac{2}{N^2} \sum_{\bar{q}_1 \bar{q}_2} [J_{\bar{R}-\bar{q}_1+\bar{q}_2} - J_{\bar{q}_1-\bar{q}_2}] \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 G_{\bar{q}_1}(E_1) G_{\bar{q}_2}(E_2) G_{\bar{R}-\bar{q}_1+\bar{q}_2}(E - E_1 + E_2) +$$

$$+ \frac{i}{2} \sum_{\bar{q}_j} \Phi_j(\bar{R}, \bar{q}) \langle\langle b_{\bar{q}_j} B_{\bar{R}-\bar{q}} | B^+ \rangle\rangle_E +$$

$$+ \frac{i}{N^2} \sum_{\bar{q}_1 \bar{q}_2} \Phi_j(\bar{R}, \bar{q}) \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 \langle\langle b_{\bar{q}_1} B_{\bar{q}_2} | B^+ \rangle\rangle_{E_1} G_{\bar{q}_2}(E_2) G_{\bar{R}-\bar{q}_1+\bar{q}_2}(E - E_1 + E_2)$$

(IV.1.14)

gde je

$$\Phi_j(\bar{\kappa}, \bar{g}) = [\bar{\kappa} \bar{l}_{\bar{g}j} (\bar{J}_{\bar{\kappa}} - \bar{J}_{\bar{\kappa}-\bar{g}}) - \bar{g} \bar{l}_{\bar{g}j} (\bar{J}_{\bar{\kappa}-\bar{g}} - J_0)] \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\bar{g}j}}}$$

(IV.1.15)

Funkciju $\langle \delta B | B^+ \rangle$ potražićemo sa harmonijskim delom hamiltonijana (IV.1.4) tj. u (IV.1.4) Pauli operatore P zamenićemo direktno Boze operatorima B. Posle kraćih računa nalazimo da harmonijski hamiltonijan (IV.1.4) ima izgled

$$H_0 = \sum_{\bar{\kappa}} \frac{1}{2} (J_0 - J_{\bar{\kappa}}) B_{\bar{\kappa}}^+ B_{\bar{\kappa}} + \sum_{\bar{\kappa}, \bar{g}, j} \hbar \omega_{\bar{g}j} b_{\bar{g}j}^+ b_{\bar{g}j} +$$

$$+ \frac{i}{2} \sum_{\bar{\kappa}, \bar{g}, j} \Phi_j(\bar{\kappa}, \bar{g}) B_{\bar{\kappa}}^+ B_{\bar{\kappa}-\bar{g}} (b_{\bar{g}j} - b_{\bar{g}j}^+)$$

(IV.1.16)

Za ovaj hamiltonijan lako nalazimo da je

$$\langle \delta_{\bar{g}j} B_{\bar{\kappa}-\bar{g}} | B_{\bar{\kappa}}^+ \rangle_E =$$

$$= \frac{i}{2} \frac{\Phi_j(\bar{\kappa}-\bar{g}-\bar{g})}{E - \frac{1}{2} (J_0 - J_{\bar{\kappa}-\bar{g}}) - \hbar \omega_{\bar{g}j}} G_{\bar{\kappa}(E)} \quad (\text{IV.1.17})$$

;

$$\langle \delta_{\bar{g}j} B_{\bar{g}_1} | B_{\bar{\kappa}}^+ \rangle_E = \frac{i}{2} \frac{\Phi_j(\bar{\kappa}_1 - \bar{g})}{E_1 - \frac{1}{2} (J_0 - J_{\bar{g}_1}) - \hbar \omega_{\bar{g}j}} G_{\bar{g}_1 + \bar{g}(E_1)}$$

(IV.1.18)

Napominjemo da bi funkcije oblike $\langle \delta B | B^+ \rangle$ računate za hamiltonijan (IV.1.16) bile proporcionalne srednjem bozonskom bro-

ju \mathcal{N} i zbog toga su one odbačene još prilikom formiranja jednačina (IV.1.8). Sada možemo konačno dati aproksimaciju u kojoj se vrši analiza u ovom paragrafu: zanemareni su članovi proporcionalni \mathcal{N}^2 , zatim članovi tipa $\mathcal{N}GDG$ i članovi tipa $\frac{\Phi}{E - E_s - E_p} G\mathcal{N}$.

Ako (IV.1.17) i (IV.1.18) zamenimo u (IV.1.14), dobijemo konačno

$$[E - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{k}}) - R_{\bar{k}} - S_{\bar{k}}]G_{\bar{k}}(E) = \frac{i}{2\pi} \left(1 + \frac{2}{N} \sum_{\bar{g}} \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle \right) - \\ - \frac{2}{N^2} \sum_{\bar{g}_1 \bar{g}_2} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 \left[E - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{k}}) + \right.$$

$$\left. + J_{\bar{k}-\bar{g}_1+\bar{g}_2} - J_{\bar{g}_1-\bar{g}_2} - T(\bar{k}, \bar{g}_1, E_1) \right] G_{\bar{g}_1}(E_1) G_{\bar{g}_2}(E_2) G_{\bar{k}-\bar{g}_1+\bar{g}_2}(E - E_1 + E_2)$$

gde je

(IV.1.19)

$$R_{\bar{k}} = \frac{1}{N} \sum (J_{\bar{k}} + J_{\bar{g}} - J_0 - J_{\bar{k}-\bar{g}}) \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle$$

$$T(\bar{k}, \bar{g}_1, E_1) = \\ = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{g} j} \frac{\Phi_j(\bar{k}, \bar{g}_1 - \bar{g}_2) \Phi_j(\bar{g}, \bar{g} - \bar{g}_1)}{E_1 - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{g}}) - \hbar \omega_{\bar{g}_1 - \bar{g}_2, j}}$$

$$S_{\bar{k}} = -\frac{1}{4} \sum_{\bar{g} j} \frac{\Phi_j(\bar{k}, \bar{g}) \Phi_j(\bar{k} - \bar{g}, -\bar{g})}{E - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{k}-\bar{g}}) - \hbar \omega_{\bar{g} j}}$$

$$\langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle = (e^{\frac{J_0 - J_{\bar{g}}}{2\theta}} - 1)^{-1}$$

(IV.1.20)

Jednačina (IV.1.19) može se napisati u skladu sa učinjenim aproksimacijama na sledeći način

$$G_{\bar{\kappa}}(E) = \frac{i}{2\tilde{\kappa}} \frac{1 + \frac{2}{N} \sum_{\bar{g}} \langle B_{\bar{g}}^+ B_{\bar{g}} \rangle_0}{E - E_{\bar{\kappa}}^{(1)}} \frac{1}{W(\kappa E)}$$

$$W(\kappa E) = 1 + \frac{4\tilde{\kappa}}{iN^2} \sum_{\bar{g}_1, \bar{g}_2} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 \left[E - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{\kappa}}) + \right.$$

$$+ J_{\bar{\kappa} - \bar{g}_1 + \bar{g}_2} - J_{\bar{g}_1 - \bar{g}_2} - \\ - \frac{1}{2} T(\bar{\kappa}, \bar{g}_1, E_1) \left] G_{\bar{g}_1}(E_1) G_{\bar{g}_2}(E_2) G_{\bar{\kappa} - \bar{g}_1 + \bar{g}_2}(E - E_1 + E_2) \right.$$

(IV.1.21)

gde je

$$E_{\bar{\kappa}}^{(1)} = \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{\kappa}}) R_{\bar{\kappa}} + S_{\bar{\kappa}}$$

(IV.1.22)

Desna strana jednačine (IV.1.21) ima jedan pol $E = E_{\bar{\kappa}}^{(1)}$ i taj pol se dobija prilikom niskotemperaturnih analiza magnetskih pojava sa uračunavanjem fononskih efekata (vidi na primer [1]). Ostali polovi ako postoje, nalaze se iz uslova

$$+ \frac{4\tilde{\kappa}}{iN^2} \sum_{\bar{g}_1, \bar{g}_2} \int_{-\infty}^{\infty} dE_1 dE_2 \left[E - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{\kappa}}) + J_{\bar{\kappa} - \bar{g}_1 + \bar{g}_2} - J_{\bar{g}_1 - \bar{g}_2} - \right.$$

$$- \frac{1}{2} T(\bar{\kappa}, \bar{g}_1, E_1) G_{\bar{g}_1}(E_1) G_{\bar{g}_2}(E_2) G_{\bar{\kappa} - \bar{g}_1 + \bar{g}_2}(E - E_1 + E_2) = 0$$

(IV.1.23)

Rešenje ovog uslova predstavljalo bi kinematičke magnonske nivoe u prisustvu fonona i analizi rešenja biće posvećeni dalji paragrafi ove glave.

2. Uslovi koji definišu kinematičke nivoe

Da bismo našli kinematičke nivoe u prisustvu fonona, koristićemo izraz (IV.1.21) za Grinovu funkciju i uslov (IV.1.23). Rešavanje ovoga uslova računski je veoma komplikovano, pa ćemo koristiti izvesne aproksimacije.

Pre svega Grinove funkcije koje figurišu u (IV.1.23) uzećemo u nultoj aproksimaciji tj.

$$G_{\bar{k}}(E) = \frac{1}{2\mathcal{R}} \frac{1}{E - \mathcal{E}_{\bar{k}} + i\delta} = \frac{i}{2\mathcal{R}} \left\{ \hat{\mathcal{P}} \frac{1}{E - \mathcal{E}_{\bar{k}}} - i\mathcal{R}\delta(E - \mathcal{E}_{\bar{k}}) \right\}$$

(IV.2.1)

gde je $\mathcal{E}_{\bar{k}}$ energija spinskih talasa u nultoj aproksimaciji i u aproksimaciji efektivne mase, tj.

$$\mathcal{E}_{\bar{k}} = \frac{1}{2} (J_0 - J_{\bar{k}}) \approx \frac{\hbar^2 K^2}{2m} ; m = \frac{\hbar^2}{I \cdot a}$$

(IV.2.2)

Ostale oznake su : a - konstanta kristalne rešetke, I integral izmene za najbliže susede i $\hat{\mathcal{P}}$ simbol za glavnu vrednost integrala.

Osim toga i za karakterističnu veličinu $T(\bar{k}, \bar{q}_1, E_1)$ uzećemo njenu približnu vrednost. Na osnovu (IV.1.15) i (IV.1.20) možemo pisati

$$T(\bar{k}, \bar{q}_1, E_1) = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{q}_j} \frac{\Phi_i(\bar{k}, \bar{q}_1, \bar{q}_j) \Phi_j(\bar{q}_j, \bar{q}_1 - \bar{q}_j)}{E_1 - \frac{1}{2}(J_0 - J_{\bar{q}_j}) - \hbar \omega_{\bar{q}_1 - \bar{q}_j, d}}$$

$$\Phi_j(\bar{\kappa}, \bar{q}) = \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\bar{q}j}}} [\bar{\kappa}\bar{l}_{\bar{q}j}(J_{\bar{\kappa}} - J_{\bar{\kappa}-\bar{q}}) - \bar{q}\bar{l}_{\bar{q}j}(J_{\bar{\kappa}-\bar{q}} - J_0) \approx$$

$$\approx -\sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\bar{q}j}}} \bar{q}\bar{l}_{\bar{q}j}(J_{\bar{\kappa}-\bar{q}} - J_0)$$

(IV.2.3)

a to znači da se prilikom izračunavanja T ograničavamo samo na longitudinalne interakcije, tj. one gde se pravac talasnog vektora poklapa sa pravcem polarizacionog vektora \vec{l} . Ako iskoristimo aproksimaciju efektivne mase i uzmemo približno da su sve tri komponente brzine zvuka međusobno jednake i jednake nekoj veličini v , onda za T dobijamo rezultat

$$T(\bar{\kappa}, \bar{q}_1, E_1) = -\frac{3}{4} \frac{\hbar^3 M_0^3}{m v^2 M} ; |T| \sim 10^{-13} \div 10^{-14} \text{ erg} \quad (\text{IV.2.4})$$

gde je $M_0 \approx 10^8 \text{ cm}^{-1}$ - granični vektor prve Briluenove zone.

Koristeći formulu (IV.2.1) možemo izvršiti integraciju po energijama posle čega se uslov (IV.1.23) svodi na

$$1 + \frac{1}{2N^2} \sum_{\bar{q}_1 \bar{q}_2} (E - E_{\bar{\kappa}} + J_{\bar{\kappa}-\bar{q}_1+\bar{q}_2} - J_{\bar{q}_1-\bar{q}_2} + T_0) \left[\frac{1}{E - E_{\bar{q}_1} + E_{\bar{q}_2} - E_{\bar{\kappa}-\bar{q}_1+\bar{q}_2}} - \right. \\ \left. - i Q d'(E - E_{\bar{q}_1} + E_{\bar{q}_2} - E_{\bar{\kappa}-\bar{q}_1+\bar{q}_2}) \right] = 0$$

gde je (IV.2.5)

$$T_0 = \frac{3}{8} \frac{\hbar^3 M_0^3}{m v^2 M} \quad (\text{IV.2.6})$$

Ako izvršimo smene talasnih vektora

$$\bar{Q}_1 - \bar{Q}_2 = \bar{D} \quad ; \quad \bar{Q}_1 = \bar{M} \quad ; \quad \bar{Q}_2 = \bar{M} - \bar{D}$$

i oznake

$$P^2 = \frac{2m(E+T_0)}{\hbar^2} \quad ; \quad Q^2 = \frac{2mE}{\hbar^2}$$

(IV.2.7)

uslov za određivanje kinematičkih nivoa svodi se konačno na

$$\frac{1}{N^2} \sum_{KD} \left\{ \frac{P^2 - 3K^2 + 4KD \cos \Theta_{KD}}{Q^2 - K^2 + 2KD \cos \Theta_{KD} - 2MD \cos \Theta_{KD}} - \right.$$

$$- i \Re(P^2 - 3K^2 + 4KD \cos \Theta_{KD}) d'(Q^2 - K^2 + 2KD \cos \Theta_{KD} - \\ - 2MD \cos \Theta_{KD}) \} = -2$$

(IV.2.8)

U sledećem paragrafu pozabavidićemo se rešavanjem ovoga uslova.

3. Energija kinematičkog nivoa

Uslov (IV.2.8) i pored svih aproksimacija koje su izvršene, nepodesan je za izračunavanje čak i pomoću računara jer se u njemu pojavljuju trostruko singularni integrali, a danas još uvek ne postoji zadovoljavajući program za numeričko rešavanje integrala ovoga tipa.

Zbog toga ćemo u uslov (IV.2.8) izvršiti dalje aproksimacije sa ciljem da dobijemo bar kvalitativnu sliku o kinematičkim nivoima.

Ako uslov (IV.2.8) posmatramo u oblasti malih \bar{K} , tj. stavimo $\bar{K}=0$ lako dolazimo do zaključka da kinematički nivoi ne postoje ili, preciznije rečeno, prigušenje im je veće od energije. Ovo je u skladu sa Dajsonovim pretpostavkama da ki-

nematičke interakcije na niskim temperaturama (kada se pobuduju ekscitacije sa K blisko nuli) ne igra bitnu ulogu u ponašanju feromagnetika.

Razmotrićemo sada šta nam uslov (IV.2.8) daje u oblasti velikih talasnih vektora. Ako u (IV.2.8) stavimo $K = M_0$ gde je M_0 granični vektor Brinuelove zone i izvršimo aproksimacije

$$P^2 - 3K^2 + 4KD \cos \theta_{KD} \approx P^2 - 3M_0^2$$

$$Q^2 - K^2 + 2KD \cos \theta_{KD} - 2MD \cos \theta_{MD} \approx Q^2 - M_0^2$$

(IV.3.1)

onda se uslov (IV.2.8) svodi na

$$A = 0$$

$$A = 2 + \frac{1}{N^2} \sum_{KD} \left\{ \frac{P^2 - 3M_0^2}{Q^2 - M_0^2} - i \Re(P^2 - 3M_0^2) \delta(Q^2 - M_0^2) \right\}$$

(IV.3.2)

Dopustićemo još da u uslovu (IV.3.2) energija E ne može da primi vrednost $E = E_0 = \frac{\hbar M_0}{2m}$, pa je tada delta funkcija u izrazu (IV.3.2) ravna nuli, tj.

$$\delta(Q^2 - M_0^2) = 0$$

(IV.3.3)

i uslov se svodi na

$$A = 0$$

$$A = 2 + \frac{1}{N^2} \sum_{KD} \frac{P^2 - 3M_0^2}{Q^2 - M_0^2} = 2 + \frac{P^2 - 3M_0^2}{Q^2 - M_0^2}$$

(IV.3.4)

Iz uslova (IV.3.4) dobijamo energiju dopunskog nivoa na granici Briluenove zone,

$$E_1(M_0) = \frac{5}{3} E_0 - \frac{1}{3} T_0$$

$$E_0 = \frac{\hbar M_0}{2m} \quad (\text{IV.3.5})$$

iz čega zaključujemo da dopunski nivo postoji na granici Brünenove zone.

Dalja ocena sastoji se u prelazu od μ_0 na promenljivi vektor \vec{K} u formuli (IV.3.5) tj.

$$E_1(\mu_0) \rightarrow E_1(K) = \frac{5}{3} \frac{t^2 K^2}{2m} - \frac{1}{3} T_0$$

$$K \in \left[\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{5} m T_0}, \mu_0 \right] \quad (\text{IV.3.6})$$

Pošto je veličina $\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{5} m T_0}$ reda $10^7 \div 10^8 \text{ cm}^{-1}$ to je очigledno da prelaz $E_1(\mu_0) \rightarrow E_1(K)$ predstavlja dobru aproksimaciju jer k u formuli (IV.3.6) veoma je blisko μ_0 . Ograničenje na $K \in \left[\frac{1}{\hbar} \sqrt{\frac{2}{5} m T_0}, \mu_0 \right]$ zato je iz zahteva da energija novih elementarnih eksitacija mora da bude pozitivna veličina.

Ako i u (IV.3.4) umesto μ_0 stavimo \vec{K} možemo pisati,

$$A \approx 3 \frac{E - E_1(K)}{E - E_0} \quad (\text{IV.3.7})$$

$$G_K(E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{E - \varepsilon_K} \frac{3(E - E_0)}{E - E_1(K)} \quad (\text{IV.3.8})$$

Ako Grinovu funkciju rastavimo na sumu prostih razlomaka, posle uobičajenih transformacija nalazimo

$$G_K(E) = \frac{i}{2\pi} \left[U(K) \frac{1}{E - \varepsilon(K)} + V(K) \frac{1}{E - E_1(K)} \right] \quad (\text{IV.3.9})$$

gde je

$$U(K) = 9 \frac{\mu_0^2 - K^2}{4K^2 - \lambda^2}$$

$$V(K) = 3 \frac{3\mu_0^2 - 5K^2 + \lambda^2}{4K^2 - \lambda^2}$$

$$(\text{IV.3.10})$$

$$\mathcal{E}_{(\bar{k})} = \mathcal{E}_k = \frac{\hbar^2 k^2}{2m}$$

$$E_1(\bar{k}) = \frac{5}{3} \mathcal{E}_{(\bar{k})} - \frac{1}{3} T_0$$

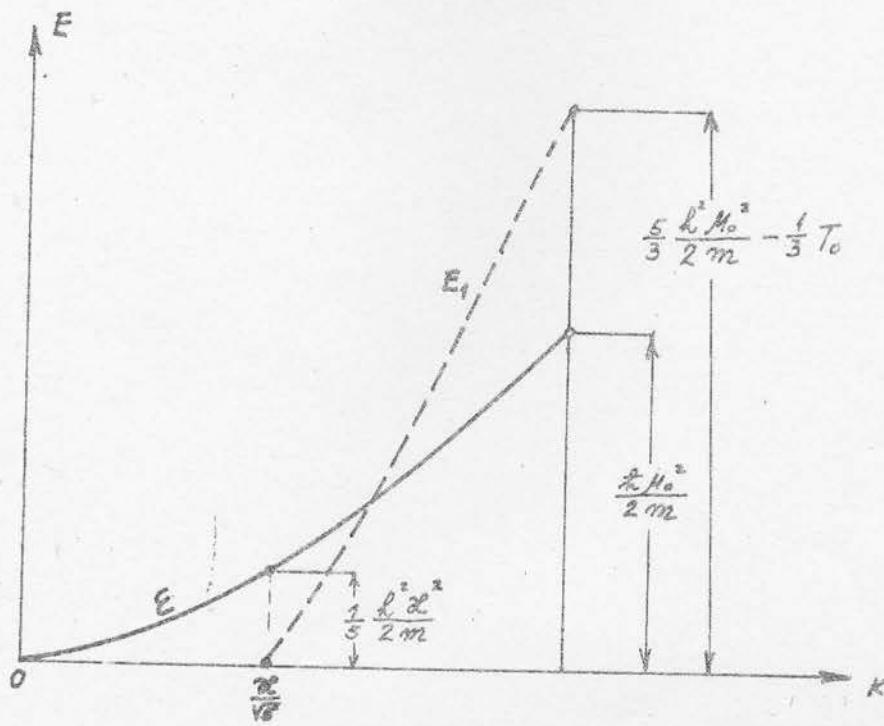
$$\mathcal{K}^2 = \frac{2mT_0}{\hbar^2} \sim 10 \text{ cm}^{-1}$$

$$K \in \left[\frac{\lambda}{\sqrt{5}}, M_0 \right) \quad ; \quad K \neq M_0$$

(IV.3.11)

Kao što se vidi iz izraza (IV.3.9) Grinova funkcija $GK(E)$ sadrži dva pola od kojih \mathcal{E} odgovara spinskim talasima, a E_1 kinematičkim pobudjenjima. Osim toga, pošto je $U(\bar{k}) = 1$ i $U(\bar{k}) \neq 0$ prisustvo kinematičke interakcije u oblastima velikih talasnih vektora ogleda se ne samo u pojavi dopunskog zakona disperzije, već i u promeni populacije spinskog talasa.

Na slici (IV.1) predstavljeni su spinski i kinematički zakoni disperzije. Resultati ove glave izloženi su u radu [67].



SL. IV.1

V G L A V A

PROBLEMI ANALIZE HAJZENBERGOVOG
ANTIFEROMAGNETIKA

1. Hamiltonijan izotropnog antiferomagnetička

Problem antiferomagnetička do sada je u literaturi izučavan sa više aspekata. Problemu energije osnovnog stanja antiferomagnetička posvećeni su radovi [68-71]. Antiferomagnetične konfiguracije izučavane su u radovima [72-78]. Niskotemperaturske karakteristike antiferomagneta proračunate su u [6] i [79-80]. Oblast temperature prelaza detaljno je izučena u fundamentalnim radovima NEEL-a [26-28].

U svim pomenutim radovima nije uzeta u obzir činjenica da antiferomagnet ne održava broj spinskih talasa, pa korekcije u tom smislu nisu ni vršene. Ova glava posvećena je problemu neodržanja spinskih talasa u antiferomagnetu i posledicama koje proizilaze iz korektnog tretmana ovog problema. Korekcije usled efekata neodržanja vršene su u duhu redova [3-5].

Izotropni antiferomagnetički sastoji se od dve podrešetke. Spinovi podrešetke imaju iste intenzitete i u slučaju kada nema spoljašnjeg magnetnog polja oni su antiparalelni. Prilikom analize pretpostavljamo da se antiferomagnetički nalazi u spoljašnjem magnetnom polju \vec{H} . U tom slučaju hamiltonijan sistema možemo napisati u obliku

$$H = - \sum_a M \vec{G}_a - \frac{1}{2} \sum_{ab} I_{ab} \vec{G}_a \vec{G}_b \quad (V.1.1)$$

$$a = \bar{n}\theta; b = \bar{m}\omega; \theta, \omega = 1/2$$

U formuli (V.1.1) \vec{G}_a i \vec{G}_b su spinski operatori atoma na mestu (a) odnosno (b), a I_{ab} ($I_{ba} = I_{ab}; I_{aa} = 0$) su integrali između. Zbog identičnosti spinova magnetni momenat M ne zavisi od atoma.

Kao što je napomenuto u IV paragrafu prve glave u sistemu spinova sa više podrešetki osnovni problem predstavlja određivanje ose orijentacije spinova za koju sistem ima minimum energije osnovnog stanja. Da bismo za sistem sa hamiltonijanom (V.1.1) odredili minimum energije osnovnog stanja, izvršićemo prelaz od spinskih operatora \vec{G} na spinske operatorе S^{α} , $\alpha = x, y, z$. Pri tome ćemo koristiti transformaciju oblika

$$\vec{G}^{\alpha} = \gamma^{\alpha} S^x + A^{\alpha} S^+ + \bar{A}^{\alpha} S^- \quad (V.1.2)$$
$$\alpha = x, y, z$$

Koeficijente transformacije (V.1.2) odredićemo tako da transformacija bude kanonička, to jest da važi

$$[\tilde{G}^x, \tilde{G}^y] = i\tilde{G}^z \quad ; \quad [\tilde{G}^y, \tilde{G}^z] = i\tilde{G}^x \quad ; \quad [\tilde{G}^z, \tilde{G}^x] = i\tilde{G}^y \quad (\text{V.1.3})$$

Osim toga, intenzitet spina mora biti očuvan pri transformaciji, što znači da mora biti ispunjen uslov

$$(\tilde{G}^x)^2 + (\tilde{G}^y)^2 + (\tilde{G}^z)^2 = (S^x)^2 + (S^y)^2 + (S^z)^2 \quad (\text{V.1.4})$$

Zamenjujući (V.1.2) u uslovima (V.1.3) i (V.1.4), dolazimo do sledećih relacija za vektore $\vec{\gamma}$, \vec{A} i \vec{A}^* :

$$\begin{aligned} \vec{\gamma}^2 &= 1 & ; \quad \vec{A}^2 = \vec{A}^{*2} = 0 & ; \quad \vec{A}\vec{A}^* = \frac{1}{2} & ; \quad \vec{\gamma}\vec{A} = \vec{\gamma}\vec{A}^* = 0 \\ \vec{\gamma}\times\vec{A} &= i\vec{A} & ; \quad \vec{A}\times\vec{\gamma} = i\vec{A}^* & ; \quad \vec{A}\times\vec{A}^* = \frac{i}{2}\vec{\gamma} \\ |\vec{A}^*|^2 &= \frac{1}{4}[1 - (\gamma^z)^2] \end{aligned} \quad (\text{V.1.5})$$

Može se pokazati da su uslovi (V.1.5) zadovoljeni ukoliko komponente vektora \vec{A} i $\vec{\gamma}$ imaju sledeći oblik

$$\begin{aligned} \vec{A}^x &= e^{iy} \frac{1 - \gamma^z}{4} - e^{-iy} \frac{1 + \gamma^z}{4} \\ \vec{A}^y &= i \left[e^{iy} \frac{1 - \gamma^z}{4} + e^{-iy} \frac{1 + \gamma^z}{4} \right] \\ \vec{A}^z &= \frac{1}{2} \sqrt{1 - (\gamma^z)^2} \quad ; \quad \operatorname{tg} \varphi = \frac{\gamma^y}{\gamma^x} \end{aligned} \quad (\text{V.1.6})$$

Ako hamiltonijan (V.1.1) ispišemo u komponentama, tj.:

$$H = - \sum_{\alpha\beta} M_{\alpha\beta} G_{\alpha}^{\beta} - \frac{1}{2} \sum_{\alpha\beta\gamma} I_{\alpha\beta\gamma} G_{\alpha}^{\beta} G_{\gamma}^{\alpha} \quad (\text{V.1.7})$$

$$\alpha = x, y, z$$

i u dobijenom izrazu zamenimo komponente na osnovu formule (V.1.2), dobijamo sledeći oblik hamiltonijana (V.1.1):

$$H = H_0 + H_1 + H_2 + H_3 + H_4 \quad (\text{V.1.8})$$

gde je

$$H_0 = -N \left\{ M S \sum_{\alpha \theta} \mathcal{K}^{\alpha} \mathcal{K}^{\alpha} + \frac{1}{2} S^2 \sum_{\alpha \theta \omega} \mathcal{K}^{\alpha} \mathcal{K}^{\alpha} J_0(\theta, \omega) \right\} \quad (\text{V.1.9})$$

$$\begin{aligned} H_1 = & - \sum_{\bar{n} \alpha \theta} S_{\bar{n} \theta}^+ \left\{ M \mathcal{K}^{\alpha} \tilde{A}_{\theta}^{\alpha} + S \sum_{\omega} \mathcal{K}_{\omega}^{\alpha} \tilde{A}_{\theta}^{\alpha} J_0(\omega, \theta) - \right. \\ & \left. - \sum_{\bar{n} \alpha \theta} S_{\bar{n} \theta}^- \left\{ M \mathcal{K}^{\alpha} \tilde{A}_{\theta}^{*\alpha} + S \sum_{\omega} \mathcal{K}_{\omega}^{\alpha} \tilde{A}_{\theta}^{*\alpha} J_0(\theta, \omega) \right\} \right\} \end{aligned} \quad (\text{V.1.10})$$

$$H_2 = \sum_{\bar{n} \alpha \theta} \left[M \mathcal{K}^{\alpha} \mathcal{K}_{\theta}^{\alpha} + S \sum_{\omega} \mathcal{K}_{\theta}^{\alpha} \mathcal{K}_{\omega}^{\alpha} J_0(\theta, \omega) \right] (S - S_{\bar{n} \theta}^z) -$$

$$- \sum_{\bar{n} \bar{m} \alpha \theta \omega} \tilde{A}_{\theta}^{*\alpha} \tilde{A}_{\omega}^{\alpha} I_{\bar{n} \bar{m}}(\theta, \omega) S_{\bar{n} \theta}^- S_{\bar{m} \omega}^+ -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m} \alpha \theta \omega} \left[\tilde{A}_{\theta}^{*\alpha} \tilde{A}_{\omega}^{\alpha} S_{\bar{n} \theta}^- S_{\bar{m} \omega}^- + \tilde{A}_{\theta}^{*\alpha} \tilde{A}_{\omega}^{\alpha} S_{\bar{n} \theta}^+ S_{\bar{m} \omega}^+ \right] I_{\bar{n} \bar{m}}(\theta, \omega) \quad (\text{V.1.11})$$

$$H_3 = - \sum_{\bar{n}\bar{m} \in \Theta\omega} [\tilde{\gamma}_\theta^\alpha \tilde{A}_\omega^\alpha I_{\bar{n}\bar{m}}(\theta, \omega) (S - S_{\bar{n}\theta}^*) S_{\bar{m}\omega}^+ + \\ + I_{\bar{n}\bar{m}} \tilde{\gamma}_\theta^\alpha \tilde{A}_\omega^\alpha S_{\bar{m}\omega}^- (S - S_{\bar{n}\theta}^*)] \quad (\text{V.1.12})$$

$$H_4 = -\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m} \in \Theta\omega} \tilde{\gamma}_\theta^\alpha \tilde{\gamma}_\omega^\alpha I_{\bar{n}\bar{m}}(\theta, \omega) (S - S_{\bar{n}\theta}^*) (S - S_{\bar{m}\omega}^*) \quad (\text{V.1.13})$$

$$J_\theta(\theta, \omega) = \sum_{\ell} I_\ell(\theta, \omega) ; \quad \ell = \bar{n} - \bar{m} \quad (\text{V.1.14})$$

Minimum energije osnovnog stanja odredićemo iz zahteva da H_0 , koje je dato formulom (V.1.9) ima minimalnu vrednost. Pošto u izrazu za H_0 figurišu samo koeficijenti $\tilde{\gamma}_\theta^\alpha$, a na osnovu (V.1.5) moraju da zadovoljavaju uslove

$$\sum_{\alpha} (\tilde{\gamma}_\theta^\alpha)^2 - 1 = 0 \quad (\text{V.1.15})$$

ili pošto $\tilde{\gamma}_\theta^\alpha = \tilde{\gamma}_{\bar{n}\theta}^\alpha$ ne zavisi od (\bar{n})

$$N \sum_{\theta} \left\{ -1 + \sum_{\alpha} (\tilde{\gamma}_\theta^\alpha)^2 \right\} = 0 \quad (\text{V.1.16})$$

Varirajući H_0 po $\tilde{\gamma}_\theta^\alpha$ uz dopunski uslov (V.1.16), koristićemo metod neodredjenih Lagranžeovih množitelja, što znači da ćemo svaki član sume po θ (V.1.16) pomnožiti Lagranžeovim množite-
ljem $S\tilde{\lambda}_\theta$, posle čega on postaje

$$SN \sum_{\theta} \left\{ -\tilde{\lambda}_\theta + \sum_{\alpha} \tilde{\lambda}_\theta (\tilde{\gamma}_\theta^\alpha)^2 \right\} = 0 \quad (\text{V.1.17})$$

i minimum određivati iz jednačine

$$\frac{\partial}{\partial \tilde{J}^{\alpha}} \left\{ M \sum_{\alpha \theta} \mathcal{H}^{\alpha} \tilde{J}_{\theta}^{\alpha} + \frac{1}{2} S \sum_{\alpha \theta \omega} \tilde{J}_{\theta}^{\alpha} \tilde{J}_{\omega}^{\alpha} J_0(\theta, \omega) + \right. \\ \left. + \sum_{\theta} \tilde{\lambda}_{\theta} (\tilde{J}_{\theta}^{\alpha})^2 \right\}$$

(V.1.18)

Na osnovu (V.1.18) za veličine $\tilde{\lambda}_{\theta}$ i $\tilde{J}_{\theta}^{\alpha}$ dobijamo sistem jednačina:

$$2\tilde{\lambda}_{\theta} \tilde{J}_{\theta}^{\alpha} - S \sum_{\omega} J_0(\theta, \omega) \tilde{J}_{\omega}^{\alpha} = M \mathcal{H}^{\alpha} \quad (V.1.19)$$

Ukoliko uzmemo da je spoljašnje magnetno polje upereno duž z ose, tj. $\mathcal{H}^{\alpha} = \mathcal{H} \delta^{\alpha z}$ gde je $\mathcal{H} = |\mathcal{H}|$ i uvedemo označku $\tilde{\lambda}_{\theta} = \frac{1}{2} S \lambda_{\theta}$ sistem jednačina (V.1.19) svodi se na

$$\lambda_{\theta} \tilde{J}_{\theta}^{\alpha} - \sum_{\omega} J_0(\theta, \omega) \tilde{J}_{\omega}^{\alpha} = \frac{M \mathcal{H}}{S} \delta^{\alpha z} \quad (V.1.20)$$

Pošto θ uzima vrednosti 1 i 2, za $\alpha = x, y$ sistem (V.1.20) svodi se na

$$(\lambda_1 - J_{11}) \tilde{J}_1^x - J_{12} \tilde{J}_2^x = 0$$

$$-J_{21} \tilde{J}_1^y + (\lambda_2 - J_{22}) \tilde{J}_2^y = 0$$

(V.1.21)

gde su uvedene označke

$$J_{11} \equiv J_0(1,1) \quad ; \quad J_{22} \equiv J_0(2,2) \quad ; \quad J_{12} = J_{21} \equiv J_0(1,2) = J_0(2,1)$$

Pošto je sistem (V.1.21) homogen, mora biti ispunjen uslov

$$(\lambda_1 - J_{11})(\lambda_2 - J_{22}) - J_{12}J_{21} = 0$$

što daje

$$\lambda_1 = J_{11} - J_{12} \quad ; \quad \lambda_2 = J_{22} - J_{21} \quad (\text{V.1.22})$$

i

$$\gamma_1^\alpha + \gamma_2^\alpha = 0 \quad \text{za } \alpha = x, y \quad (\text{V.1.23})$$

za $\alpha = z$ sistem (V.1.20) se svodi na jednu jednačinu

$$\gamma_1^z + \gamma_2^z = -\frac{M\mathcal{H}}{SJ_{12}} \quad (\text{V.1.24})$$

Ukoliko pretpostavimo da je $\gamma_1^z = \gamma_2^z$ iz (V.1.24) dobijamo

$$\gamma_1^z = \gamma_2^z = -\frac{M\mathcal{H}}{2SJ_{12}} \quad (\text{V.1.25})$$

Stabilnost antiferomagnetika zahteva da integrali izmene u svakoj od podrešetki J_{11} odnosno J_{22} budu pozitivni (svaka od podrešetki se ponaša kao feromagnet), dok integrali izmene koji deluju izmedju spinova raznih podrešetki (J_{12} i J_{21}) moraju biti negativni što znači da je

$$J_{12} = J_{21} = -|J_{12}| \quad (\text{V.1.26})$$

Tada možemo pisati

$$\gamma_1^z = \gamma_2^z = \frac{M\mathcal{H}}{2S|J_{12}|} = \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_0} = h \quad (\text{V.1.27})$$

gde je

$$\mathcal{H}_c = \frac{2S|J_{12}|}{M} \quad (V.1.28)$$

kritična veličina magnetnog polja za antiferomagnet. Pošto γ_1^z i γ_2^z predstavljaju kosinuse pravaca osa kvantizacije podreški očigledno je da mora biti

$$h = \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_c} < 1 \quad (V.1.29)$$

a to znači da sistem ima antiferomagnetsko ponašanje sve do te, dok je spoljašnje magnetsko polje \mathcal{H} manje od vrednosti $\frac{2S|J_{12}|}{M}$. Kao što vidimo, veličina kritičnog polja odredjena je veličinom interakcije između podreški J_{12} , a uopšte ne zavisi od interakcija J_{11} i J_{22} između spinova koji pripadaju istoj podreški.

Za γ_1^z i γ_2^z koji su dati formulama (V.1.27), na osnovu (V.1.5) i (V.1.6) dobijamo

$$\begin{aligned} \gamma_1^x &= \sqrt{1-h} & ; \quad \gamma_1^y &= 0 & ; \quad \gamma_1^z &= h & ; \quad A_1^x &= -\frac{h}{2} \\ A_1^y &= \frac{i}{2} & ; \quad A_1^z &= \frac{1}{2}\sqrt{1-h^2} \end{aligned} \quad (V.1.30)$$

Koristeći formule (V.1.30) nalazimo da je energija osnovnog stanja antiferomagneta data sa

$$H_0 = -NS \left\{ hM\mathcal{H} + \frac{1}{2}S(J_{11}+J_{22}+2|J_{12}|) \right\} \quad (V.1.31)$$

dok kompletan hamiltonijan sistema ima oblik

$$\begin{aligned} H &= H_0 + \sum_{\bar{n}\theta} \Delta_\theta (S - S_{\bar{n}\theta}^z) - \sum_{\bar{n}\bar{m}\omega} X_{\bar{n}\bar{m}}(\theta, \omega) S_{\bar{n}\theta}^- S_{\bar{m}\omega}^+ - \\ &- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}\theta\omega} Y_{\bar{n}\bar{m}}(\theta, \omega) (S_{\bar{n}\theta}^- S_{\bar{m}\omega}^- + S_{\bar{m}\omega}^+ S_{\bar{n}\theta}^+) - \end{aligned}$$

$$-\sum_{\bar{n}\bar{m}\theta\omega} Z_{\bar{n}\bar{m}}(\theta, \omega) [S_{\bar{n}\theta}(S - S_{\bar{m}\omega}^z) + (S - S_{\bar{n}\omega}^z) S_{\bar{n}\theta}^+] -$$

$$-\frac{1}{2} \sum_{\bar{n}\bar{m}\theta\omega} W_{\bar{n}\bar{m}}(\theta, \omega) (S - S_{\bar{n}\theta}^z)(S - S_{\bar{m}\omega}^z)$$

$$\theta, \omega = 1, 2$$

(V.1.32)

Oznake upotrebљene u formuli (V.1.32) su sledeće:

$$\Delta_1 = S(J_{11} - J_{12}) = S(J_{11} + |J_{12}|)$$

$$\Delta_2 = S(J_{22} - J_{21}) = S(J_{22} + |J_{21}|)$$

$$X_{\bar{n}\bar{m}}(11) = \frac{1}{2} I_{\bar{n}\bar{m}}(11) \quad ; \quad X_{\bar{n}\bar{m}}(22) = \frac{1}{2} I_{\bar{n}\bar{m}}(2,2)$$

$$X_{\bar{n}\bar{m}}(1,2) = -\frac{\hbar^2}{2} I_{\bar{n}\bar{m}}(12) \quad ; \quad X_{\bar{n}\bar{m}}(2,1) = -\frac{\hbar^2}{2} I_{\bar{n}\bar{m}}(21)$$

$$Y_{\bar{n}\bar{m}}(11) = 0 \quad ; \quad Y_{\bar{n}\bar{m}}(2,2) = 0$$

$$Y_{\bar{n}\bar{m}}(1,2) = \frac{1}{2} (1 - \hbar^2) I_{\bar{n}\bar{m}}(12) \quad ; \quad Y_{\bar{n}\bar{m}}(21) = \frac{1}{2} (1 - \hbar^2) I_{\bar{n}\bar{m}}(21)$$

$$Z_{\bar{n}\bar{m}}(11) = 0 \quad ; \quad Z_{\bar{n}\bar{m}}(22) = 0$$

$$Z_{\bar{n}\bar{m}}(12) = \hbar \sqrt{1 - \hbar^2} I_{\bar{n}\bar{m}}(12) \quad ; \quad Z_{\bar{n}\bar{m}}(21) = \hbar \sqrt{1 - \hbar^2} I_{\bar{n}\bar{m}}(21)$$

$$W_{\bar{n}\bar{m}} = I_{\bar{n}\bar{m}}(11) \quad ; \quad W_{\bar{n}\bar{m}}(22) = I_{\bar{n}\bar{m}}(22)$$

$$W_{\bar{n}\bar{m}}(12) = -(1 - 2\hbar^2) I_{\bar{n}\bar{m}}(12)$$

$$W_{\bar{n}\bar{m}}(21) = -(1 - 2\hbar^2) I_{\bar{n}\bar{m}}(21)$$

(V.1.33)

Kao što vidimo, hamiltonijan (V.1.33) primenjen na vakum ne daje tačno vrednost H_0 , što je posledica prisustva članova proporcionalnih funkcijama Y i Z . Drugim rečima, minimizirano H_0 (formula (V.1.32)), još uvek ne predstavlja korektnu energiju osnovnog stanja. U daljim paragrafima ove glave izvršćemo unitarnu transformaciju hamiltonijana (V.1.33), sa ciljem da za energiju osnovnog stanja nadjemo korektniji izraz nego što je izraz (V.1.32).

2. Unitarna transformacija antiferomagnetskog hamiltonijana i korigovana energija osnovnog stanja

Kao što je već napomenuto, hamiltonijan (V.1.33) zbog prisustva članova tipa $S^- S^- + \text{k.k.}$ nema dobro definisanu energiju osnovnog stanja, jer $H|S\rangle \neq H_0|S\rangle$. Zbog toga je neophodno izvršiti rotaciju prostora spinskih stanja sa ciljem da se koriguje energija osnovnog stanja. To znači, da ćemo izvršiti unitarnu transformaciju hamiltonijana (V.1.33), sa ciljem da eliminišemo uticaj onih delova hamiltonijana H (članovi proporcionalni $S^- S^- + \text{k.k.}$ koji vektoru $|S\rangle$ ne dopuštaju da bude čisto vakumsko stanje sistema. Zbog velikih matematičkih teškoća, eliminacija se može izvršiti samo aproksimativno.

Od hamiltonijana (V.1.33) preći ćemo na ekvivalentni hamiltonijan koristeći Vajlov identitet.

$$H_{eq} = e^{\hat{F}} H e^{\hat{F}} \quad (\text{V.2.1})$$

Operator \hat{F} mora biti antiermitski ($\hat{F}^+ = -\hat{F}$) da bi transformacija (V.2.1) bila unitarna. Pošto želimo da eliminišemo delove hamiltonijana H koji su proporcionalni $S^- S^- + \text{k.k.}$, operator \hat{F} biramo u obliku

$$\hat{F} = \hat{F}_1 - \hat{F}_1^+$$

$$\hat{F}_1 = \sum_a \alpha_a S_a^+ + \sum_{ab} \beta_{ab} S_a^+ S_b^+$$

$$\alpha = \bar{n}/\mu \quad ; \quad \beta = \bar{m}/\nu \quad (\text{V.2.2})$$

$$\mu, \nu = 1, 2$$

Neodredjene funkcije α i β_{ab} su realne i za β_{ab} važi
 $\beta_{ab} = \beta_{ba}$ ($\beta_{aa} = 0$) jer su i koeficijenti u hamiltoniju (V.1.33) realni i simetrični. Deo proporcionalan S_a^+ u operatoru \hat{F} neophodan je jer komutiranje hamiltonijana H sa $S_a^+ S_b^+$ dovodi do članova tipa S_a^+ odnosno S_b^- koje takođe treba eliminisati. Funkcija α biće odredjena iz zahteva da se iz H_{eq} eliminisu pomenuti linearni članovi. Relacija (V.2.1) biće korišćena u aproksimaciji

$$H_{eq} = e^{-\hat{F}} H e^{\hat{F}} \approx H - [\hat{F}, H] + \frac{1}{2} [\hat{F}, [\hat{F}, H]]$$

$$[\hat{F}, H] = [\hat{F}_1, H] + [\hat{F}_1, H]^+$$

(V.2.3)

Posle izvršenih komutiranja i zahteva da iz izraza (V.2.3) budu eliminisani delovi proporcionalni $S^+ S^-$ + k.k. i $S^- + k.k.$ za funkcije α i β , dobijamo sledeći sistem integralnih jednačina

$$\begin{aligned} \Delta_\mu \alpha_\nu - 2S \sum_\nu [X_{\mu\nu}(0) + Y_{\mu\nu}(0)] \alpha_\nu - \\ - 4SN \sum_{\bar{q}} Z_{\mu\nu}(\bar{q}) \beta_{\mu\nu}(\bar{q}) = 0 \\ - \alpha_\mu Z_{\mu\nu}(\bar{k}) + 2\Delta_\mu \beta_{\mu\nu}(\bar{k}) - 4S \sum_\nu X_{\nu\nu}(\bar{k}) \beta_{\mu\nu}(\bar{k}) - \\ - N \sum_{\bar{q}} W_{\mu\nu}(\bar{k}-\bar{q}) \beta_{\mu\nu}(\bar{q}) = -\frac{1}{2} Y_{\mu\nu}(\bar{k}) \end{aligned}$$

$$\mu, \nu, \omega = 1, 2 \quad (\text{V.2.4})$$

U sistemu (V.2.4) je

$$X_{\mu\nu}(\bar{k}) = \sum_{\bar{q}} X_{\bar{q}}(\mu, \nu) e^{-i\bar{k}\bar{q}} \quad ; \quad Y_{\mu\nu}(\bar{k}) = \sum_{\bar{q}} Y_{\bar{q}}(\mu, \nu) e^{-i\bar{k}\bar{q}}$$

$$Z_{\mu\nu}(\bar{k}) = \sum_{\bar{q}} Z_{\bar{q}}(\mu, \nu) e^{-i\bar{k}\bar{q}} \quad ; \quad W_{\mu\nu}(\bar{k}) = \sum_{\bar{q}} W_{\bar{q}}(\mu, \nu) e^{-i\bar{k}\bar{q}}$$

$$\beta_{\mu\nu}(\bar{k}) = \sum \beta_{(\mu,\nu)} e^{-ik\bar{l}}$$

$$\beta_{(\mu,\nu)} \equiv \beta_{ab}$$

$$\bar{l} = \bar{n} - \bar{m}$$

(V.2.5)

Rešavajući sistem (V.2.4) metodom iteracija za funkcije α i β , dobijamo sledeće izraze

$$\alpha_1 = \alpha_2 = \frac{\hbar\sqrt{1-\hbar^2}}{4S}$$

$$\beta_{11}(\bar{k}) = \beta_{22}(\bar{k}) = \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)}{8S} T_{\bar{k}}^2$$

$$\beta_{12}(\bar{k}) = \beta_{21}(\bar{k}) = \frac{1-\hbar^2}{8S} T_{\bar{k}}$$

$$T_{\bar{k}} = \frac{J_{\bar{k}}(1,2)}{J_0(1,2)} ; \quad T_2 = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} T_{\bar{k}}^2$$

(V.2.6)

Analizirajući dobijeni rezultat vidimo da se kao mali parametar razvoja (V.2.1) javlja veličina $\frac{\sqrt{1-\hbar^2}}{4S}$. Pojava faktora $\sqrt{1-\hbar^2}$ je razumljiva, jer kada $\hbar \rightarrow \hbar_c$ tada $\hbar \rightarrow 1$ i antiferomagnet postaje feromagnet u kome, kao što se zna, nema članova tipa $S^-S^+ + \text{k.k.}$ Imenilac $4S$ ukazuje na to, da je aproksimacija (V.2.3) utoliko bolja, ukoliko je spin veći.

Ekvivalentni hamiltonijan, dobijen posle unitarne transformacije (V.2.1) u aproksimaciji (V.2.2), može se napisati u sledećem obliku:

$$H_{eq} = H'_{eq} + H''_{eq}$$

$$H'_{eq} = H_0 + dH_0 + \sum_i \tilde{\Delta}_i (S - S_i^*) - \sum_{ij} \tilde{X}_{ij} S_i^- S_j^+ -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{ij} \tilde{W}_{ij} (S - S_i^*)(S - S_j^*) + \sum_{ija} \tilde{W}_{ija} S_j^- (S - S_i^*) S_a^+$$

$$\begin{aligned}
 H''_{eq} = & - \sum_{ij} Z_{ij}(S - S_j^*) S_i^+ + \sum_{ija} [\tilde{Z}_{ija} S_i^- S_j^+ S_a^+ - \\
 & - \tilde{Z}_{ija} S_i^+ S_j^+ S_a] + \sum_{ija} \tilde{W}_{ija} (S - S_i^*) S_j^+ S_a^+ + \\
 & + \sum_{ija} \Phi_{ija} (S - S_i^*)(S - S_j^*) S_a^+ + CC
 \end{aligned}$$

$$i = \bar{n}\theta \quad ; \quad j = \bar{m}\omega \quad ; \quad a = \bar{\ell}\mu$$

(V.2.7)

Oznake u hamiltonijanu (V.2.7) su sledeće:

$$H_0 = -NS^2 \left\{ (1+2\hbar^2) |J_{12}(0)| + \frac{1}{2} [J_{11}(0) + J_{22}(0)] \right\} \quad (V.2.8)$$

$$\delta H_0 \approx -N(1-\hbar^2)^2 |J_{12}(0)| \left\{ ST_2 - \hbar^2 T_2 \right\} = N(1-\hbar^2)^2 T_2 |J_{12}(0)| (S - \hbar^2) \quad (V.2.9)$$

$$\tilde{\Delta}_1 = \Delta_1 - (1-\hbar^2)(1-2\hbar^2) J_{12}(0) T_2 + \hbar^4 (1-\hbar^2)^2 J_{12}(0) T_4 -$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\hbar(1-\hbar^4)(1-\hbar^2)^{3/2}}{8} J_{12}(0) T_2 - \frac{(1-\hbar^2)^2}{2} J_{12}(0) \left[P_2^{(1)} + \hbar^4 P_4^{(1)} \right] + \\
 & + \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)}{2S} J_{12}(0) T_2
 \end{aligned}$$

$$\tilde{\Delta}_2 = \Delta_2 - (1-\hbar^2)(1-2\hbar^2) J_{12}(0) T_2 + \hbar^4 (1-\hbar^2)^2 J_{12}(0) T_4 -$$

$$\begin{aligned}
 & - \frac{\hbar(1-\hbar^4)(1-\hbar^2)^{3/2}}{8} J_{12}(0) T_2 - \frac{(1-\hbar^2)^2}{2} J_{12}(0) \left[P_2^{(2)} + \hbar^4 P_4^{(2)} \right] + \\
 & + \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)}{2S} J_{12}(0) T_2
 \end{aligned}$$

$$+ \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)}{2S} J_{12}(0) T_2$$

$$\mathcal{P}_2^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{q}}^2 \frac{J_{22}(\bar{q}) - J_{11}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}$$

$$\mathcal{P}_2^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{q}}^2 \frac{J_{11}(\bar{q}) - J_{22}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}$$

$$\mathcal{P}_4^{(1)} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{q}}^4 \frac{J_{11}(\bar{q}) - J_{11}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}$$

$$\mathcal{P}_4^{(2)} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{q}}^4 \frac{J_{11}(\bar{q}) - J_{22}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}$$

(V.2.10)

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{11}(\bar{k}) &= \chi_{11}(\bar{k}) - \frac{(1-h^2)^2}{4} J_{12}(0) T_{\bar{k}}^2 (1+h^4 T_{\bar{k}}^2) + \\ &+ \frac{(1-h^2)^2}{8} J_{12}(0) T_{\bar{k}}^2 \left\{ \frac{J_{22}(\bar{k}) - J_{11}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)} + \right. \\ &\quad \left. + h^4 T_{\bar{k}}^2 \frac{J_{11}(\bar{k}) - J_{11}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)} \right\} + \frac{h(1-h^2)^{5/2}}{16S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{k}}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned} \tilde{\chi}_{22}(\bar{k}) &= \chi_{22}(\bar{k}) - \frac{(1-h^2)^2}{4} J_{12}(0) T_{\bar{k}}^2 (1+h^4 T_{\bar{k}}^2) + \\ &+ \frac{(1-h^2)^2}{8} J_{12}(0) T_{\bar{k}}^2 \left\{ \frac{J_{11}(\bar{k}) - J_{22}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)} + \right. \\ &\quad \left. + h^4 T_{\bar{k}}^2 \frac{J_{22}(\bar{k}) - J_{22}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)} \right\} + \frac{h(1-h^2)^{5/2}}{16S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{k}}^2 \end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{X}_{12}(\bar{\kappa}) &= X_{12}(\bar{\kappa}) - \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)^2}{8} J_{12}(0) T_{\bar{\kappa}}^3 (3 + \hbar^4 T_{\bar{\kappa}}^2) + \\ &+ \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)^2}{8} J_{12}(0) T_{\bar{\kappa}}^3 \frac{J_{11}(\bar{\kappa}) - J_{11}(0) + J_{22}(\bar{\kappa}) - J_{22}(0) + 2J_{12}(0)}{J_{12}(0)} \\ &- \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)}{2S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}}^2 + \\ &+ \frac{\hbar(1-\hbar^2)^{5/2}}{16S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}}^2\end{aligned}$$

$$\begin{aligned}\tilde{X}_{21}(\bar{\kappa}) &= X_{21}(\bar{\kappa}) - \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)^2}{8} J_{12}(0) T_{\bar{\kappa}}^3 (3 + \hbar^4 T_{\bar{\kappa}}^2) + \\ &+ \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)^2}{8} J_{12}(0) T_{\bar{\kappa}}^3 \frac{J_{11}(\bar{\kappa}) - J_{11}(0) + J_{22}(\bar{\kappa}) - J_{22}(0) + 2J_{12}(0)}{J_{12}(0)} \\ &- \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)}{2S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}}^2 + \\ &+ \frac{\hbar(1-\hbar^2)^{5/2}}{16S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}}^2\end{aligned}$$

(v.2.11)

$$\tilde{W}_{11}(\bar{\kappa}) = W_{11}(\bar{\kappa}) - \frac{\hbar(1-\hbar^2)^{5/2}}{4S} J_{12}(0) T_{\bar{\kappa}}^2 -$$

$$- \frac{\hbar^4(1-\hbar^2)^2}{4S} J_{12}(0) \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{\kappa}-\bar{q}}^2 T_{\bar{q}}^2 [1 -$$

$$- \frac{J_{11}(\bar{q}) - J_{11}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}]$$

$$\tilde{W}_{22}(\bar{\kappa}) = W_{22}(\bar{\kappa}) - \frac{\hbar^2(1-\hbar^2)^{5/2}}{4S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}}^2 -$$

$$- \frac{\hbar^4(1-\hbar^2)^2}{4S} J_{12}(0) \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{\kappa}-\bar{q}}^2 T_{\bar{q}}^2 [1 - \frac{J_{22}(\bar{q}) - J_{22}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}]$$

$$\tilde{W}_{12}(\bar{\kappa}) = W_{12}(\bar{\kappa}) - \frac{\hbar^3(1-\hbar^2)^{5/2}}{4S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}}^3 +$$

$$+ \frac{2\hbar^2(1-\hbar^2)}{S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{\kappa}} - \frac{(1-\hbar^2)^2}{2S} J_{12}(0) \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{\kappa}-\bar{q}} T_{\bar{q}} -$$

$$- \frac{(1-\hbar^2)^2}{4S} J_{12}(0) \frac{1}{N} \sum_{\bar{q}} T_{\bar{\kappa}-\bar{q}} T_{\bar{q}} [\hbar^4 T_{\bar{q}}^2 -$$

$$- \frac{J_{22}(\bar{q}) - J_{11}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}(0)}]$$

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{21}(\bar{K}) = & W_{21}(\bar{K}) - \frac{\hbar^3(1-\hbar^2)^{5/2}}{4S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{K}}^3 + \frac{2\hbar^2(1-\hbar^2)}{S} J_{12}(0) T_2 T_{\bar{K}} - \\ & - \frac{(1-\hbar^2)^2}{2S} J_{12}(0) \frac{1}{N} \sum_{\bar{Q}} T_{\bar{K}-\bar{Q}} T_{\bar{Q}} - \frac{(1-\hbar^2)^2}{4S} J_{12}(0) \frac{1}{N} \sum_{\bar{Q}} T_{\bar{K}-\bar{Q}} \\ & \cdot \left[\hbar^4 T_{\bar{Q}}^2 - \frac{J_{11}(\bar{Q}) - J_{22}(0) + J_{12}(0)}{J_{12}} \right] \end{aligned} \quad (\text{V.2.12})$$

$$\begin{aligned} Z_{\theta\omega}(\bar{K}) = & Z_{\theta\omega}(\bar{K}) + \alpha\omega [X_{\theta\omega}(\bar{K}) + Y_{\theta\omega}(\bar{K})] + \\ & + \frac{1}{2} \alpha\omega [C_{\theta\omega}(\bar{K}) + D_{\theta\omega}(\bar{K})] - \\ & - 4N^{-1} \sum_{\bar{Q}} \beta_{\theta\omega}(\bar{K}-\bar{Q}) Z_{\theta\omega}(\bar{Q}) + 2N^{-1} \sum_{\bar{Q}} \beta_{\theta\omega}(\bar{K}-\bar{Q}) E_{\theta\omega}(\bar{Q}) - \\ & - 4S \sum_{\bar{K}} Z_{\omega\mu}(\bar{K}) / \beta_{\theta\mu}(\bar{K}) + \\ & + 2S \sum_{\bar{K}} E_{\omega\mu}(\bar{K}) / \beta_{\theta\mu}(\bar{K}) + \\ & + 2SA\alpha\beta_{\theta\omega}(\bar{K}) - \alpha\omega W_{\theta\omega}(\bar{K}) \end{aligned} \quad (\text{V.2.13})$$

$$\begin{aligned} \tilde{W}_{\theta\omega\mu}(\bar{K}, \bar{Q}) = & -2Y_{\theta\omega}(\bar{K}) / \beta_{\theta\mu}(\bar{Q}) + D_{\theta\omega}(\bar{K}) / \beta_{\theta\mu}(\bar{Q}) - \\ & - 2Y_{\theta\mu}(\bar{Q}) / \beta_{\theta\omega}(\bar{K}) + \\ & + 2D_{\theta\mu}(\bar{Q}) / \beta_{\theta\omega}(\bar{K}) \end{aligned} \quad (\text{V.2.14})$$

$$\tilde{W}_{\theta\omega\mu}(\bar{K}, \bar{Q}) = \left[-4X_{\theta\omega}(\bar{K}) + 2C_{\theta\omega}(\bar{K}) + 2W_{\theta\omega}(\bar{K}) \right] / \beta_{\theta\mu}(\bar{Q}) \quad (\text{V.2.15})$$

$$\tilde{Z}_{ij\alpha} = -\tilde{Z}_{ij\alpha} \equiv \tilde{Z}_{\omega\mu}(\bar{R}, \bar{\xi}) \equiv \tilde{Z}_{\omega\mu}(\bar{R}, \bar{\xi}) =$$

$$= [-2Z_{\omega}(\bar{R}) + E_{\omega}(\bar{R})] \beta_{\omega\mu}(\bar{R}) \quad (\text{V.2.16})$$

$$\Phi_{ij\alpha} \equiv \Phi_{\omega\mu}(\bar{R}, \bar{\xi}) = [-4Z_{\omega}(\bar{R}) + 2E_{\omega}(\bar{R})] \beta_{\omega\mu}(\bar{R}) \quad (\text{V.2.17})$$

Ostale oznake su sledeće

$$C_{\omega}(\bar{R}) = 2S \sum_{\mu} [Y_{\omega\mu}(\bar{R}) / \beta_{\omega\mu}(\bar{R}) + Y_{\omega\mu}(\bar{R}) / \beta_{\omega\mu}(\bar{R})]$$

$$D_{\omega}(\bar{R}) = -4\Delta_{\omega}\beta_{\omega}(\bar{R}) + 8S \sum_{\mu} \beta_{\omega\mu}(\bar{R}) X_{\omega\mu}(\bar{R})$$

$$E_{\omega}(\bar{R}) = 4S \sum_{\mu} \beta_{\omega\mu}(\bar{R}) Y_{\omega\mu}(\bar{R})$$

(V.2.18)

Analizu osobina antiferomagnetičkog stanja ćemo izvršiti u sledećim paragrafima koristeći hamiltonijan (V.2.7). Ovde ćemo, na osnovu formule (V.2.8) i (V.2.9) proceniti kolike korekcije dobija energija osnovnog stanja H_0 usled izvršene rotacije sistema. Formule (V.2.8) i (V.2.9) uzećemo aproksimativno, tj. zanemarićemo $J_{11}(0)$ i $J_{22}(0)$ u odnosu na $J_{12}(0)$. Ovo, ako se podrešetke antiferomagnetičkog stanja prožimaju tako da je spin jedne podrešetke okružen spinovima druge podrešetke, odgovara aproksimaciji najbližih suseda. Znači uzećemo

$$H_0 \approx -NS^2 |J_{12}(0)| (1+2h^2)$$

$$\delta H_0 \approx -NS |J_{12}(0)| T_2 (1-h^2)^2$$

(V.2.19)

Veličina δH_0 predstavlja korekciju energije osnovnog stanja usled unitarne transformacije (V.2.1). Uzećemo da je $|J_{12}(0)| =$

$= 10^{-13}$ erga, $N = 5,023 \cdot 10^{23}$ atoma. Za kristal proste kubne strukture $T_2 = 1/6$. Za spin S uzećemo dve vrednosti $S = 2$ i $S = 4$, dok ćemo za h takodje koristiti dve vrednosti $h = 0,1$ i $h = 0,9$. Rezultati numeričkog računa dati su u tački 1.

S	h	$ H_0 J$	$ dH_0 J$	$\frac{dH_0}{H_0} \%$
2	0,1	6143	1968	32 %
2	0,9	63121	72	0,114 %
4	0,1	115642	3935	3,4 %
4	0,9	1009937	145	0,0143 %

Kao što vidimo iz tabele 1, popravke su bitnije ukoliko je h manje, tj. ukoliko je spoljašnje polje daleko od kritične veličine koja prevodi antiferomagnet u feromagnet. Ovakav rezultat se i mogao očekivati, jer efekti neodržanja kvazičestica (delovi hamiltonijana proporcionalni $S^-S^- + \text{k.k.}$) su veoma izraženi u antiferomagnetu, dok ih u feromagneticima uopšte nema.

3. Harmonijski zakoni disperzije i magnetizacija na niskim temperaturama

U prethodnom paragrafu pokazano je da eliminacija efekata neodržanja dovodi do korekcije energije osnovnog stanja antiferomagneta. Korigovana energija osnovnog stanja niže je od odgovarajuće vrednosti ove energije koja se dobija ako se efekti neodržanja spinskih talasa ignorisu. Ovde ćemo analizirati korigovane harmonijske zakone disperzije koji se dobijaju iz hamiltonijana (V.2.7) uz korišćenje Blohove aproksimacije

za spinske operatore. Takođe ćemo analizirati odgovarajuće spektre koje daje nekorigovani hamiltonijan (V.1.32) i napraviti poređenje rezultata sa ciljem da razjasnimo kolika se greška čini, ako se ne uzmu u obzir posledice neodržanja spin-skih talasa u antiferomagnetiku.

Efektivni hamiltonijan za harmonijsku analizu antiferomagnetika kojeg sledi iz formule (V.2.7) ima oblik

$$H_{eq}^{eff} = \sum_{\theta\omega} \tilde{\Delta}_{\theta\omega} B_{\theta\omega}^+ B_{\theta\omega} - 2S \sum_{\bar{n}\bar{m}\omega} \tilde{X}_{\theta\omega}(\bar{n}-\bar{m}) B_{\theta\omega}^+ B_{\theta\omega}$$

$$\Theta, \omega \in (1, 2) \quad (V.3.1)$$

Posle Furije transformacija Boze operatora B izraz (V.3.1) može se napisati u obliku

$$H_{eq}^{eff} = \sum_{\vec{k}} h(\vec{k})$$

$$h(\vec{k}) = \sum_{\theta\omega} \Lambda_{\theta\omega}(\vec{k}) B_{\theta\omega}^+ B_{\theta\omega} \quad (V.3.2)$$

$$\Lambda_{\theta\omega}(\vec{k}) = \tilde{\Delta}_{\theta\omega} - 2S \tilde{X}_{\theta\omega}(\vec{k})$$

Da bismo dijagonalizovali kvadratnu formu (V.3.2), koristićemo jednačine kretanja za operatore B

$$i \frac{d}{dt} B_{\theta\omega}(\vec{k}) = [B_{\theta\omega}(\vec{k}), h(\vec{k})] = \sum_{\omega} \Lambda_{\theta\omega}(\vec{k}) B_{\omega}(\vec{k}) \quad (V.3.3)$$

i izvršiti prelaz od Boze operatora B na nove Boze operatorе C koristeći transformaciju

$$B_{\theta\omega}(\vec{k}) = \sum_{\mu} \Psi_{\theta\mu}(\vec{k}) C_{\mu}(\vec{k}) \quad (V.3.4)$$

$$\mu \in (1, 2)$$

Da bi transformacija (V.3.4) bila kanonička, funkcije ψ moraju zadovoljavati uslove

$$\sum_{\mu} \Psi_{\theta\mu}(\bar{R}) \Psi_{\omega\mu}(\bar{R}) = \delta_{\theta\omega} \quad (\text{V.3.5})$$

a da bi transformacija (V.3.4) imala i inverznu transformaciju, mora važiti uslov

$$\sum_{\theta} \Psi_{\theta\mu}(\bar{R}) \Psi_{\theta\nu}^{*}(\bar{R}) = \delta_{\mu\nu} \quad (\text{V.3.6})$$

Zamenom (V.3.4) u (V.3.2), dolazimo do dijagonalizovanog hamiltonijana

$$H_{eq}^{\text{eff}} = \sum_{\bar{R}A} E_{\mu}(\bar{R}) C_{\mu}^{+}(\bar{R}) C_{\mu}(\bar{R}) \quad (\text{V.3.7})$$

pri čemu se, na osnovu uslova (V.3.3), energije elementarnih ekscitacija određuju rešavanjem sekularne jednačine sledećeg homogenog sistema jednačina

$$E(\bar{R}) \Psi_{\theta\mu}(\bar{R}) = \sum_{\omega} \Lambda_{\theta\omega}(\bar{R}) \Psi_{\omega\mu}(\bar{R}) \quad (\text{V.3.8})$$

$\mu = 1, 2$

Izjednačujući determinantu sistema (V.3.8) sa nulom, dolazimo do zakona disperzije za dve grane elementarnih ekscitacija koji su sledećeg oblika

$$E_1(\bar{R}) = \tilde{\Delta} - 2S[\tilde{X}_{11}(\bar{R}) + \tilde{X}_{12}(\bar{R})]$$

$$E_2(\bar{R}) = \tilde{\Delta} - 2S[\tilde{X}_{11}(\bar{R}) - \tilde{X}_{12}(\bar{R})] \quad (\text{V.3.9})$$

Prilikom dobijanja ovih rezultata korišćena je činjenica da je $\tilde{\Delta}_1 = \tilde{\Delta}_2 = \tilde{\Delta}$, $\tilde{X}_{11} = \tilde{X}_{22}$ i $\tilde{X}_{12} = \tilde{X}_{21}$.

Ako rezultate (V.3.9) napišemo za prostu kubnu rešetku i u aproksimaciji najbližih suseda, onda dolazimo do rezulta-

$$E_{1(\bar{k})} = 6SI \left[1 - \frac{1}{3} h^2 f(\bar{k}) \right] - \frac{SI}{6} (1-h^2)^2 f^2(\bar{k})$$

$$E_{2(\bar{k})} = 6SI \left[1 + \frac{1}{3} h^2 f(\bar{k}) \right] - \frac{SI}{6} (1-h^2)^2 f^2(\bar{k})$$

(V.3.10)

gde je

$$f(\bar{k}) = \sum_{\alpha} \cos K_{\alpha} d$$

$$d = x, y, z \quad (\text{V.3.11})$$

U formulama (V.3.10) i (V.3.11) I je vrednost integrala izmene J_{12} za najbliže susede. Zanemareni su integrali izmene J_{11} i J_{22} što znači da pretpostavljamo da su za spin jedne podrešetke najbliži susedi spinovi druge podrešetke. Konstanta kristalne rešetke označena je sa a .

Ako uvedemo granični vektor Briluenove zone $K_B = \frac{Q}{a}(\bar{i} + \bar{j} + \bar{k})$ dolazimo do zaključka da je

$$E_{2(\bar{k}_B - \bar{k})} = E_{1(\bar{k})}$$

(V.3.12)

Za male talasne vektore možemo uzeti $f(k) = 3 - \frac{1}{2}a^2 K^2$ i $f(k)^2 = 9 - 3a^2 K^2$, pa je u tom slučaju

$$E_{1(\bar{k})} = \Delta_{\epsilon}(h) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_{\epsilon}(h)}$$

(V.3.13)

gde je

$$\Delta_{\epsilon}(h) = 3SI \frac{(1-h^2)(3+h^2)}{2}$$

(V.3.14)

$$m_{\epsilon}(h) = \frac{\hbar^2}{SI \alpha^2 (1+h^2)}$$

Za $E_2(k)$ važi ista formula, samo se umesto k mora pisati $K_B - k$.

Kao što vidimo, elementarne ekscitacije imaju kvadratni zakon disperzije sa gepom.

Da bismo uporedili dobijeni rezultat sa rezultatom koji daje nekorigovani hamiltonijan (V.1.32), naći ćemo zakone disperzije koji slede iz ovog hamiltonijana. Pri tome ćemo korištiti iste aproksimacije kao i u slučaju računa sa korigovanim hamiltonijanom (V.2.7). U harmonijskoj aproksimaciji hamiltonijan (V.1.32) ima oblik

$$\begin{aligned} H^{eff} = & \sum_{\theta\omega} \Delta_\theta B_\theta(\bar{n}) B_\theta(\bar{n})^+ - \\ & - 2S \sum_{\bar{n}\bar{m}\theta\omega} X_{\theta\omega}(\bar{n}-\bar{m}) B_\theta(\bar{n})^+ B_\omega(\bar{m}) - \\ & - S \sum_{\bar{n}\bar{m}\theta\omega} Y_{\theta\omega}(\bar{n}-\bar{m}) [B_\theta(\bar{n})^+ B_\omega(\bar{m}) + B_\omega(\bar{m}) B_\theta(\bar{n})] \end{aligned} \quad (V.3.15)$$

Posle Furije transforma Boze operatora B izraz (V.3.15) prelazi u

$$H^{eff} = \sum_K h(K)$$

$$h(K) = \sum_{\theta\omega} M_{\theta\omega}(K) B_\theta(K)^+ B_\omega(K) + \frac{1}{2} \sum_{\theta\omega} N_{\theta\omega}(K) [B_\theta(K)^+ B_\omega(-K) + B_\omega(-K) B_\theta(K)]$$

$$M_{\theta\omega}(K) = \Delta_\theta \delta_{\theta\omega} - 2S X_{\theta\omega}(K)$$

$$N_{\theta\omega}(K) = -2S Y_{\theta\omega}(K)$$

(V.3.16)

Jednačine kretanja za operatore B glase:

$$i \frac{d}{dt} B_\theta(K) = \sum_\omega [M_{\theta\omega}(K) B_\omega(K) + N_{\theta\omega}(K) B_\omega(K)^+] = [B_\omega(K), h(K)]$$

(V.3.17)

Ako od operatora B predjemo na nove operatore C putem kanoničke transformacije

$$B_{\theta(\bar{\kappa})} = \sum_{\mu} [U_{\theta\mu}(\bar{\kappa}) C_{\mu}(\bar{\kappa}) + V_{\theta\mu}^{*}(-\bar{\kappa}) C_{\mu}^{+}(-\bar{\kappa})] \quad (V.3.18)$$

gde funkcije u i v zadovoljavaju uslove

$$\sum_{\mu} [U_{\theta\mu}(\bar{\kappa}) U_{\omega\mu}^{*}(-\bar{\kappa}) - V_{\theta\mu}^{*}(-\bar{\kappa}) V_{\omega\mu}(-\bar{\kappa})] = D_{\theta\omega}$$

$$\sum_{\nu} [U_{\theta\nu}(\bar{\kappa}) U_{\omega\nu}^{*}(-\bar{\kappa}) - V_{\theta\nu}^{*}(-\bar{\kappa}) V_{\omega\nu}(-\bar{\kappa})] = D_{\theta\nu} \quad (V.3.19)$$

i (V.3.19) zamenimo u (V.3.17), za određivanje funkcija u i v dobijamo sledeći sistem jednačina

$$\mathcal{E}(\bar{\kappa}) U_{\theta\mu}(\bar{\kappa}) = \sum_{\omega} [M_{\theta\omega}(\bar{\kappa}) U_{\omega\mu}(\bar{\kappa}) + N_{\theta\omega}(\bar{\kappa}) V_{\omega\mu}(\bar{\kappa})]$$

$$-\mathcal{E}(\bar{\kappa}) V_{\theta\mu}(\bar{\kappa}) = \sum_{\omega} [M_{\theta\omega}(\bar{\kappa}) V_{\omega\mu}(\bar{\kappa}) + N_{\theta\omega}(\bar{\kappa}) U_{\omega\mu}(\bar{\kappa})]$$

$$\Theta = 1,2$$

(V.3.20)

Energije $\mathcal{E}(\bar{\kappa})$ određuju se iz sekularne jednačine sistema (V.3.20) i imaju oblik:

$$\mathcal{E}_{1,2}(\bar{\kappa}) = \sqrt{\Delta^2 + A^2 - B^2 \pm 2\Delta A}$$

$$\Delta = \Delta_1 = \Delta_2$$

$$A = -2S X_{12}(\bar{\kappa}) \quad ; \quad B = -2S Y_{12}(\bar{\kappa}) \quad (V.3.21)$$

Na osnovu formule (V.1.33) izraze za energiju \mathcal{E} možemo napisati u obliku

$$\mathcal{E}_{1,2}(\bar{\kappa}) = S |J_{12}(0)| \sqrt{1 - (1 - 2h^2) T_{\bar{\kappa}}^2 \mp 2h^2 T_{\bar{\kappa}}} \approx$$

$$\approx S|J_{12}(0)|(1-\hbar^2 T_{\bar{k}}) - S|J_{12}(0)|T_{\bar{k}}^2 \frac{(1-\hbar^2)^2}{2} + O(T_{\bar{k}}^3)$$

Napomenimo, da su i izrazi za energije $E_{1,2}(k)$ takođe dobijeni sa ostatkom od $T^3(k)$. (V.3.22)

Hamiltonijan (V.3.15) dijagonalizuje se po operatorima C i ima oblik

$$H^{eff} = \sum_{\bar{k}, \mu} \mathcal{E}_{\mu(\bar{k})} C_{\mu(\bar{k})}^+ C_{\mu(\bar{k})}$$

$$\mu = 1, 2$$

tako da funkcije $\mathcal{E}(\bar{k})$ koje su date formulom (V.3.22) predstavljaju energije elementarnih ekscitacija za slučaj nekorigovanog hamiltonijana antiferomagnetička. (V.3.23)

U aproksimaciji najbližih suseda formule (V.3.22) postaju

$$\mathcal{E}_1(\bar{k}) = 6SI \left[1 - \frac{1}{3} \hbar^2 f(\bar{k}) \right] - \frac{SI}{3} (1 - \hbar^2)^2 f^2(\bar{k})$$

$$\mathcal{E}_2(\bar{k}) = 6SI \left[1 + \frac{1}{3} \hbar^2 f(\bar{k}) \right] - \frac{SI}{3} (1 - \hbar^2)^2 f^2(\bar{k})$$

I ovde, kao i u slučaju energije $E(k)$, važi uslov (V.3.24)

$$\mathcal{E}_2(\bar{k}_s - \bar{k}) = \mathcal{E}_1(\bar{k})$$

Poredeći izraze (V.3.24) i (V.3.10) vidimo da korekcija usled neodržanja spinskih talasa dovodi do povišenja energije elementarnih ekscitacija za veličinu (V.3.25)

$$tj. \delta E(\bar{k}) = \frac{SI}{6} (1 - \hbar^2)^2 f^2(\bar{k}) (V.3.26)$$

$$E_{1,2}(\bar{k}) = \mathcal{E}_{1,2}(\bar{k}) + \delta E(\bar{k}) (V.3.27)$$

U aproksimaciji malih talasnih vektora možemo pisati

$$E_1(\bar{e}) = \Delta_e(h) + \frac{\hbar^2 K^2}{2m_e(h)} \quad (\text{V.3.28})$$

gde je

$$\Delta_e(h) = 3SI(1-h^4).$$

$$m_e(h) = \frac{\hbar^2}{2SI\alpha^2(1-h^2+h^4)} \quad (\text{V.3.29})$$

Kao što vidimo, korekcije usled neodržanja pokazuju da je stvarna efektivna masa magnona $m_E(h)$ za male h skoro dvostruko veća od nekorigovane mase $m_e(h)$ jer je njihov odnos

$$\frac{m(h)}{m_e(h)} = 2 \frac{1-h^2+h^4}{1+h^4} \approx 2 \text{ za } h \approx 0 \quad (\text{V.3.30})$$

Na kraju ovog paragrafa izračunaćemo korigovanu niskotemperatursku magnetizaciju i uporediti je sa magnetizacijom koju daje nekorigovani hamiltonijan. Na osnovu formule (vidi [1] strana 150) opšti izraz za magnetizaciju glasi:

$$M = M(0) - M(\Theta) \quad (\text{V.3.31})$$

gde je

$$M(0) = -\frac{\partial H_0}{\partial \mathcal{H}}$$

$$M(\Theta) = \sum_{\bar{e}, \mu} \frac{\partial E_{\mu}(\bar{e})}{\partial \mathcal{H}} N_{\mu}(\bar{e})$$

$$N_{\mu}(\bar{e}) = (e^{\frac{E_{\mu}(\bar{e})}{\Theta}} - 1)^{-1}$$

$$\mu = 1,2 \quad (\text{V.3.32})$$

Koristeći izraze ka korigovanu energiju osnovnog stanja i korigovane zakone disperzije, dolazimo do rezultata

$$M^{(E)} = M_{(0)}^{(E)} - M_{(\theta)}^{(E)}$$

$$M_{(0)}^{(E)} = N \left[2\mu h s + \frac{1}{3} \mu h (1-h^2) \right]$$

$$\begin{aligned} M_{(\theta)}^{(E)} &= -N \left[\mu h (1-h^2) \left(\frac{\alpha^2 m_e \theta}{2\pi \epsilon^2} \right)^{\frac{1}{2}} Z_{3/2} \left(\frac{\Delta_E}{\theta} \right) - \right. \\ &\quad \left. - \mu h \frac{3}{2} \left(\frac{\alpha^2 m_e \theta}{2\pi \epsilon^2} \right)^{\frac{1}{2}} Z_{5/2} \left(\frac{\Delta_E}{\theta} \right) \right] \end{aligned}$$

$$Z_p(x) = \sum_{n=-\infty}^{\infty} n^p e^{-nx} \quad (\text{V.3.33})$$

Za deo magnetizacije koji zavisi od θ , i koji se dobija metodom u-v transformacija, možemo pisati

$$\begin{aligned} M_{(0)}^{(c)} &= -N \left[2\mu h^3 \left(\frac{\alpha^2 m_e \theta}{2\pi \epsilon^2} \right)^{\frac{1}{2}} Z_{3/2} \left(\frac{\Delta_E}{\theta} \right) + \right. \\ &\quad \left. + \mu h (1-2h^2) \frac{3}{2} \left(\frac{\alpha^2 m_e \theta}{2\pi \epsilon^2} \right)^{\frac{1}{2}} Z_{5/2} \left(\frac{\Delta_E}{\theta} \right) \right] \end{aligned}$$

(V.3.34)

Kao što vidimo izrazi (V.3.33) i (V.3.34) se bitno razlikuju. Magnetizacija za $\theta=0$ koju daje kvaziklasični prikaz iznosi

$$M_{(0)}^c = N/2 \mu h s$$

(V.3.35)

Kao što vidimo, usled rotacije koja eliminiše efekte neodržanja, magnetizacija pri $\theta=0$ dobija korekciju

$$\delta M_{(0)} = N \frac{1}{3} \mu h (1-h^2)$$

(V.3.36)

tj. $M_{(0)}^{(E)} = M_{(0)}^c + \delta M_{(0)}$

Ako uzmemo da $h=0,5$ i $\mu = 5 \cdot 10^{-20} \text{ erg}/\alpha$ onda je

$$\delta M_{(0)} = 3,76 \cdot 10^3 \text{ erg}/\alpha$$

(V.3.37)

Za spin $S = 1$ i sve ostale podatke iste, dobijamo

$$M_{(0)}^{(\epsilon)} = 3,01 \cdot 10^4 \quad (\text{V.3.38})$$

tako da je odnos

$$\frac{\delta M_{(0)}^{(\epsilon)}}{M_{(0)}^{(\epsilon)}} = 0,12 \quad (\text{V.3.39})$$

što znači da korekcija magnetizacije iznosi oko 12%.

4. Aproksimacija haotičnih faza za antiferomagnetik

Unitarna transformacija hamiltonijana antiferomagnetika pomoću koje smo eliminisali efekte spinskih talasa, dovela je do ekvivalentnog hamiltonijana (V.2.7) koji je matematički pogodniji za izračunavanje termodinamičkih karakteristika sistema nego hamiltonijan (V.1.32). U ovom paragrafu demonstriramo gornju tvrdnju analizirajući H_{eq} u aproksimaciji haotičnih faza (ili aproksimaciji Tjablikova). Da bismo račune pojednostavili, pretpostavimo da su spinovi obeju podrešetki ravni $S = \frac{1}{2}$. Tada spinski operatori postaju Pauli operatori. Treba naglasiti, s obzirom na činjenicu da je mali parametar razvoja Vajlovog reda $\frac{\sqrt{1-h}}{4S}$, da će račun sa ekvivalentnim hamiltonijanom biti tačniji ukoliko je h bliže jedinici, jer za $S = \frac{1}{2}$ faktor $4S$ u imeniocu malog parametra nije dovoljno veliki da bi obezbedio brzu konvergenciju Vajlovog reda. Osim toga, u daljoj analizi od hamiltonijana (V.2.7) zadržaćemo samo članove koji su proporcionalni $\tilde{\Delta}, \tilde{X} \text{ i } \tilde{W}$. Uz sve ove napomene za dalju analizu imamo sledeći efektivni hamiltonijan

$$H_{\text{eq}}^{\text{eff}} = \sum_{\bar{n}, \bar{m}} \Delta_{\mu} P_{\mu}^{+}(\bar{n}) P_{\mu}(\bar{n}) - \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m} \mu \nu} L_{\mu \nu}(\bar{n} - \bar{m}) P_{\mu}^{+}(\bar{n}) P_{\nu}(\bar{m}) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\bar{n} \bar{m} \mu \nu} M_{\mu \nu}(\bar{n} - \bar{m}) P_{\mu}^{+}(\bar{n}) P_{\mu}(\bar{n}) P_{\nu}^{+}(\bar{m}) P_{\nu}(\bar{m})$$

$$\Delta_{\mu} \equiv \tilde{\Delta}_{\mu} \quad ; \quad L_{\mu \nu}(\bar{n} - \bar{m}) \equiv 2 X_{\mu \nu}(\bar{n} - \bar{m})$$

$$M_{\mu\nu}(\bar{a}-\bar{m}) = \tilde{W}_{\mu\nu}(\bar{a}-\bar{m})$$

$$\mu, \nu = 1, 2$$

(V.4.1)

Analizu sistema sa hamiltonijanom (V.4.1) izvršićemo koristeći Paulionsku Grinovu funkciju

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\bar{a}, \bar{b}, t) = \langle\langle P_{\alpha}(\bar{a}, t) | P_{\beta}^{+}(\bar{b}, t) \rangle\rangle \quad (V.4.2)$$

$$\alpha, \beta \in 1, 2$$

U skladu sa opštom teorijom Grinovih funkcija možemo pisati

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \Gamma_{\alpha\beta}(\bar{a}, \bar{b}, t) &= i \delta(t) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\bar{a}\bar{b}} \langle [P_{\alpha}(\bar{a}t), P_{\beta}^{+}(\bar{a}t)] \rangle + \\ &+ \langle\langle [P_{\alpha}(\bar{a}t), H_{eq}^{eff}] \Big| P_{\beta}^{+}(\bar{b}0) \rangle\rangle \end{aligned} \quad (V.4.3)$$

Kada se u jednačini (V.4.3) zameni vrednost komutatora, ova jednačina se svodi na

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \Gamma_{\alpha\beta}(\bar{a}, \bar{b}, t) &= i \delta(t) \delta_{\alpha\beta} \delta_{\bar{a}\bar{b}} (1 - 2 \langle P_{\alpha}^{+}(\bar{a}t) P_{\alpha}(\bar{a}t) \rangle) + \\ &+ \sum_{\bar{m}\nu} R_{\alpha\nu}(\bar{a}-\bar{m}) \Gamma_{\nu\beta}(\bar{m}\bar{b}t) + \\ &+ \sum_{\bar{m}\nu} L_{\alpha\nu}(\bar{a}-\bar{m}) \langle\langle P_{\alpha}^{+}(\bar{a}t) P_{\alpha}(\bar{a}t) P_{\nu}(\bar{m}t) \Big| P_{\beta}^{+}(\bar{b}0) \rangle\rangle - \\ &- \sum_{\bar{m}\nu} M_{\alpha\nu}(\bar{a}-\bar{m}) \langle\langle P_{\nu}^{+}(\bar{m}t) P_{\nu}(\bar{m}t) P_{\alpha}(\bar{a}t) \Big| P_{\beta}^{+}(\bar{b}0) \rangle\rangle \end{aligned}$$

$$R_{\alpha\beta}(\bar{a}-\bar{b}) = \Delta_{\alpha} \delta_{\alpha\beta} \delta_{\bar{a}\bar{b}} - L_{\alpha\beta}(\bar{a}-\bar{b})$$

(V.4.4)

U aproksimaciji Tjablikova (ili aproksimaciji haotičnih faza) više Grinove funkcije se dekupljuju na sledeći način

$$\begin{aligned} & \langle\langle R_{\alpha}^+(\bar{a}t) R_{\alpha}(\bar{a}t) R_{\beta}(\bar{m}t) | R_{\beta}^+(\bar{b}t) \rangle\rangle = \\ & = \langle R_{\alpha}^+(\bar{a}t) R_{\alpha}(\bar{a}t) \rangle \langle\langle R_{\beta}(\bar{m}t) | R_{\beta}^+(\bar{b}t) \rangle\rangle \\ & \langle\langle R_{\beta}^+(\bar{m}t) R_{\beta}(\bar{m}t) R_{\alpha}(\bar{a}t) | R_{\alpha}^+(\bar{b}t) \rangle\rangle = \\ & = \langle R_{\beta}^+(\bar{m}t) R_{\beta}(\bar{m}t) \rangle \langle\langle R_{\alpha}(\bar{a}t) | R_{\alpha}^+(\bar{b}t) \rangle\rangle \end{aligned}$$

(V.4.5)

Uvodeći označku $\langle R_{\alpha}^+(\bar{a}t) R_{\alpha}(\bar{a}t) \rangle = N_{\alpha\alpha}$, pri čemu $N_{\alpha\alpha}$ ne zavisi od indeksa ćelije, a ni od vremena t, relaciju (V.4.4) možemo napisati u obliku

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \Gamma_{\alpha\beta}(\bar{a}\bar{b}t) &= i \delta(t) \delta^{\bar{a}\bar{b}} \delta_{\alpha\beta} (1 - 2N_{\alpha\alpha}) + \\ &+ \sum_{\bar{m}\bar{b}} R_{\alpha\bar{b}}(\bar{a}-\bar{m}) \Gamma_{\bar{b}\beta}(\bar{m}\bar{b}t) + \\ &+ \sum_{\bar{m}\bar{b}} L_{\alpha\bar{b}}(\bar{a}-\bar{m}) N_{\alpha\alpha} \Gamma_{\bar{b}\beta}(\bar{m}\bar{b}t) - \\ &- \sum_{\bar{m}\bar{b}} M_{\alpha\bar{b}}(\bar{a}-\bar{m}) N_{\beta\beta} \Gamma_{\alpha\bar{b}}(\bar{a}\bar{b}t) \end{aligned}$$

(V.4.6)

Posle Furije transformacije

$$\Gamma_{\alpha\beta}(\bar{a}\bar{b}t) = \frac{1}{\pi} \sum_{\bar{k}} \int_{-\infty}^{\infty} dE \Gamma_{\alpha\beta}(\bar{k}, E) e^{i\bar{k}(\bar{a}-\bar{b}) - iEt}$$

$$R_{\alpha\beta}(\bar{a}-\bar{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} R_{\alpha\beta}(\bar{k}) e^{i\bar{k}(\bar{a}-\bar{m})}$$

$$L_{\alpha\beta}(\bar{a}-\bar{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} L_{\alpha\beta}(\bar{k}) e^{i\bar{k}(\bar{a}-\bar{m})}$$

$$M_{\alpha\beta}(\bar{a}-\bar{m}) = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} M_{\alpha\beta}(\bar{k}) e^{i\bar{k}(\bar{a}-\bar{m})}$$

$$\delta_{\bar{a}\bar{b}} = \frac{1}{N} \sum_{\bar{k}} e^{i\bar{k}(\bar{a}-\bar{b})}$$

$$\delta(t) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iEt}$$

(V.4.7)

gde je N broj elementarnih čelija u sistemu, (V.4.6) se svedi na

$$E\Gamma_{\alpha\beta}(\bar{k}, E) = \frac{i}{2\pi} \delta_{\alpha\beta} (1 - 2N_{\alpha\beta}) +$$

$$+ \sum_{\beta} R_{\alpha\beta}(\bar{k}) \Gamma_{\beta\beta}(\bar{k}, E) +$$

$$+ \sum_{\beta} L_{\alpha\beta}(\bar{k}) N_{\alpha\beta} \Gamma_{\beta\beta}(\bar{k}, E) -$$

$$- \sum_{\beta} M_{\alpha\beta}(0) N_{\beta\beta} \Gamma_{\beta\beta}(\bar{k}, E)$$

$\alpha, \beta \in \{1, 2\}$ (V.4.8)

Relacija (V.4.8) predstavlja sistem jednačina za određivanje Grinovih funkcija $\Gamma_{\alpha\beta}(\bar{k}, E)$. Da bismo pojednostavili račun, sistem (V.4.8) napisaćemo u vidu samo jedne matrične jednačine. Ako uvedemo matrice

$$\hat{\Gamma}(\bar{k}, E) = \|\Gamma_{\alpha\beta}(\bar{k}, E)\|$$

$$\hat{R}(\bar{k}) = \|R_{\alpha\beta}(\bar{k})\|$$

$$\hat{L}(\bar{k}) = \|L_{\alpha\beta}(\bar{k})\|$$

$$\begin{aligned}\hat{M}_{(\bar{\kappa})} &= \| M_{\alpha\beta}(\bar{\kappa}) \| & ; \quad \hat{E} &= \| E_{\alpha\beta} \| \\ \hat{N} &= \| N_{\alpha\beta} \| & ; \quad \hat{N}_d &= \| N_{\alpha\beta} \tilde{d}_{\alpha\beta} \| \\ \hat{I} &= \| \tilde{d}_{\alpha\beta} \| & ; \quad N_{\alpha\beta} &= \langle R_\beta^+ R_\alpha \rangle\end{aligned}$$

(V.4.9)

onda lako zaključujemo da je (V.4.8) ekvivalentno sledećoj matričnoj jednačini

$$\begin{aligned}\hat{E} \hat{\Gamma}_{(\bar{\kappa}, E)} &= \frac{i}{2\pi} (1 - 2 \hat{N}_d) + \hat{R}_{(\bar{\kappa})} \hat{\Gamma}_{(\bar{\kappa}, E)} + \\ &+ (\hat{N}_d \hat{L}_{(\bar{\kappa})}) \hat{\Gamma}_{(\bar{\kappa}, E)} - [S_d (\hat{M}(0) \hat{N}_d)]_d \hat{\Gamma}_{(\bar{\kappa}, E)}\end{aligned}$$

$$S_d (\hat{A} \hat{B}_d) = \sum_r A_{\alpha r} B_{\alpha r}$$

$$[S_d (\hat{A} \hat{B}_d)]_d = \|\tilde{d}_{\alpha\beta} \sum_r A_{\alpha r} B_{\alpha r}\|$$

(V.4.10)

Uvodeći osnaku

$$\hat{R}_{(\bar{\kappa})} + \hat{N}_d \hat{L}_{(\bar{\kappa})} - [S_d (\hat{M}(0) \hat{N}_d)]_d = \hat{T}_{(\bar{\kappa})}$$

(V.4.11)

jednačinu (V.4.10) možemo napisati u obliku

$$[\hat{E} - \hat{T}_{(\bar{\kappa})}] \hat{\Gamma}_{(\bar{\kappa}, E)} = \frac{i}{2\pi} (\hat{I} - 2 \hat{N}_d)$$

(V.4.12)

Sada možemo uvesti unitarnu matricu \hat{U} :

$$\hat{U} = \| U_{\alpha\beta} \| \quad ; \quad \hat{U}^\dagger = \hat{U}^{-1}$$

(V.4.13)

koja dijagonalizuje matricu \hat{T} , tj.

$$\hat{U}^{-1} \hat{T} \hat{U} = \hat{\Omega} \quad ; \quad \hat{\Omega} = \| \Omega_{\alpha\alpha} \tilde{d}_{\alpha\beta} \|$$

$$\hat{T} \hat{U} = \hat{U} \hat{\Omega} \quad (V.4.14)$$

posle čega se (V.4.12) svodi na

$$\hat{\Gamma}_U(\bar{K}, E) = \frac{i}{2g\epsilon} (\hat{E} - \hat{\Omega})^{-1} (\hat{1} - 2\hat{N}_U)$$

$$\hat{N}_U = \left\| \sum_r N_{rr} \hat{U}_{ru} \hat{U}_{r\beta} \right\|$$

$$\hat{\Gamma}_U(\bar{K}, E) = \hat{U}^{-1} \hat{\Gamma}(\bar{K}, E) \hat{U}$$

(V.4.15)

Na osnovu teoreme o spektralnoj intenzivnosti Grinove funkcije, možemo pisati

$$\hat{N}(\bar{K}) = \left\| \langle P_\alpha^+(\bar{K}) P_\alpha(\bar{K}) \rangle \right\| = 2 \int_{-\infty}^{\infty} dE (e^{\frac{E}{\theta}} - 1)^{-1} R_e \hat{\Gamma}_U(\bar{K}, E) \quad (V.4.16)$$

i pošto je

$$\hat{\Gamma}_U(\bar{K}, E) = \frac{i}{2g\epsilon} \hat{D}(\hat{E} - \hat{\Omega})^{-1} (\hat{1} - 2\hat{N}_U) + \frac{1}{2} \hat{D}(\hat{E} - \hat{\Omega})$$

$$\hat{D}(\hat{E} - \hat{\Omega}) = \left\| D_{\alpha\beta} \delta[E - \Omega_{\alpha\beta}(\bar{K})] \right\|$$

(V.4.17)

konačno dobijamo

$$\hat{N}(\bar{K}) = \left\| \frac{D_{\alpha\beta} - 2 \sum_{r=1}^2 N_{rr} \hat{U}_{ru} \hat{U}_{r\beta}}{e^{\frac{\Omega_{\alpha\beta}(\bar{K})}{\theta}} - 1} \right\|$$

(V.4.18)

Kao što vidimo, matrica srednjeg okupacionog paulionskog broja $\hat{N}(\bar{K})$ nije dijagonalna, pa se stvarne vrednosti srednjeg okupacionog broja dobijaju posle dijagonalizacije matrice $\hat{N}(\bar{K})$ putem unitarne transformacije \hat{V} , tj.

$$\hat{N}(\bar{K}) \hat{V} = \hat{V} \hat{N}(\bar{K}) \quad ; \quad \hat{N}(\bar{K}) = \left\| \langle P_\alpha^+(\bar{K}) P_\alpha(\bar{K}) \rangle D_{\alpha\beta} \right\|$$

$$\hat{V}^+ = \hat{V}^{-1} \quad (V.4.19)$$

Dobijene rezultate ćemo konkretizovati. Elemente matrice \hat{U} koja dijagonalizuje matricu \hat{T} možemo odrediti iz sistema jednačina

$$\begin{aligned} (T_{11}-\Omega)U_{11} + T_{12}U_{21} &= 0 \\ (T_{11}-\Omega)U_{12} + T_{12}U_{22} &= 0 \\ T_{21}U_{11} + (T_{22}-\Omega)U_{21} &= 0 \\ T_{21}U_{12} + (T_{22}-\Omega)U_{22} &= 0 \end{aligned} \quad (\text{V.4.20})$$

Energije elementarnih ekscitacija dobijaju se kao rešenje sekularne jednačine bilo kog od dva sistema (V.4.20), tj.

$$\begin{vmatrix} T_{11}-\Omega & T_{12} \\ T_{21} & T_{22}-\Omega \end{vmatrix} = 0 \quad (\text{V.4.21})$$

odakle je

$$\Omega_{11,22}(\bar{\kappa}) = \frac{T_{11}(\bar{\kappa}) + T_{22}(\bar{\kappa})}{2} \pm \sqrt{\left[\frac{T_{11}(\bar{\kappa}) - T_{22}(\bar{\kappa})}{2} \right]^2 + T_{12}(\bar{\kappa}) T_{21}(\bar{\kappa})} \quad (\text{V.4.22})$$

Unitarna matrica \hat{U} ima oblik

$$\hat{U} = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2(\bar{\kappa})}} \begin{vmatrix} 1 & \beta(\bar{\kappa}) \\ -\beta(\bar{\kappa}) & 1 \end{vmatrix}; \quad (\text{V.4.23})$$

$$\text{gde je } \hat{U}^{-1} = \hat{U}^* = \frac{1}{\sqrt{1+\beta^2(\bar{\kappa})}} \begin{vmatrix} 1 & -\beta(\bar{\kappa}) \\ \beta(\bar{\kappa}) & 1 \end{vmatrix}$$

$$\beta(\bar{\kappa}) = \frac{T_{11}(\bar{\kappa}) - T_{22}(\bar{\kappa})}{2T_{12}(\bar{\kappa})} - \sqrt{\left[\frac{T_{11}(\bar{\kappa}) - T_{22}(\bar{\kappa})}{2T_{12}(\bar{\kappa})} \right]^2 + \frac{T_{21}(\bar{\kappa})}{T_{12}(\bar{\kappa})}}$$

$$(\text{V.4.24})$$

Koristeći (V.4.23) možemo naći elemente matrice $\hat{N}(\vec{k})$:

$$N_{11}(\vec{k}) = \left[e^{\frac{\Omega_1(\vec{k})}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \left\{ 1 - \frac{2}{1 + \beta^2(\vec{k})} [N_{11} + \beta^2(\vec{k}) N_{22}] \right\}$$

$$N_{22}(\vec{k}) = \left[e^{\frac{\Omega_{22}(\vec{k})}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \left\{ 1 - \frac{2}{1 + \beta^2(\vec{k})} [\beta^2(\vec{k}) N_{11} + N_{22}] \right\}$$

$$N_{12}(\vec{k}) = \left[e^{\frac{\Omega_1(\vec{k})}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \frac{2\beta(\vec{k})}{1 + \beta^2(\vec{k})} (N_{11} - N_{22})$$

$$N_{21}(\vec{k}) = \left[e^{\frac{\Omega_{22}(\vec{k})}{\theta}} - 1 \right]^{-1} \frac{2\beta(\vec{k})}{1 + \beta^2(\vec{k})} (N_{11} - N_{22})$$

(V.4.25)

i tada su elementi dijagonalne matrice $\hat{\eta}(\vec{k})$, na osnovu (V.4.19) dati su:

$$\begin{aligned} \eta_{11}(\vec{k}) &= \langle R_1^+(\vec{k}) R_1(\vec{k}) \rangle = \frac{N_{11}(\vec{k}) + N_{22}(\vec{k})}{2} + \\ &+ \sqrt{\left[\frac{N_{11}(\vec{k}) - N_{22}(\vec{k})}{2} \right]^2 + N_{12}(\vec{k}) N_{21}(\vec{k})} \end{aligned}$$

(V.4.26)

Srednji okupacioni brojevi po čvoru rešetke su:

$$\langle R_1^+(\vec{n}) R_1(\vec{n}) \rangle = N_{11} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \eta_{11}(\vec{k})$$

$$\langle R_2^+(\vec{n}) R_2(\vec{n}) \rangle = N_{22} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \eta_{22}(\vec{k})$$

(V.4.27)

Na osnovu (V.4.1), (V.4.4) i (V.4.11), nalazimo elemente matrice $\hat{T}(k)$. Oni su sledećeg oblika

$$T_{\alpha\beta}(\bar{k}) = R_{\alpha\beta}(\bar{k}) + N_{\alpha\alpha} L_{\alpha\beta}(\bar{k}) - \sum_r M_{\alpha r}(0) N_{r\beta} \quad (V.4.28)$$

ili konkretnije

$$T_{11}(\bar{k}) = \tilde{\Delta}_1 - 2 \tilde{X}_{11}(\bar{k}) + N_{11} [2 \tilde{X}_{11}(\bar{k}) - \tilde{W}_{11}(0)] - N_{22} \tilde{W}_{12}(0)$$

$$T_{22}(\bar{k}) = \tilde{\Delta}_2 - 2 \tilde{X}_{22}(\bar{k}) + N_{22} [2 \tilde{X}_{22}(\bar{k}) - \tilde{W}_{22}(0)] - N_{11} \tilde{W}_{21}(0)$$

$$T_{12}(\bar{k}) = 2 \tilde{X}_{12}(\bar{k})(N_{11} - 1)$$

$$T_{21}(\bar{k}) = 2 \tilde{X}_{21}(\bar{k})(N_{22} - 1)$$

(V.4.29)

Na osnovu nadjenih zakona disperzije (V.4.22) i srednjih paulionskih okupacionih brojeva (V.4.26), možemo naći magnetizaciju sistema u aproksimaciji haotičnih faza. Obzirom na činjenicu da $\Omega_{dd}(\bar{k})$ i $\eta_{dd}(\bar{k})$ zavise od spoljašnjeg magnetskog polja \mathcal{H} , na osnovu formule (V.3.30), za magnetizaciju dobijamo sledeći izraz:

$$M = M(0) - M(\Theta) = - \frac{\partial H_0}{\partial \mathcal{H}} - \sum_{\bar{k}\alpha} \frac{\partial \Omega_{dd}(\bar{k}, \theta, \mathcal{H})}{\partial \mathcal{H}} \eta_{dd}(\bar{k}, \theta, \mathcal{H})$$

(V.4.30)

Ova formula može da posluži za određivanje Nell-ove temperature za antiferomagnetik sa spinom $S = \frac{1}{2}$.

Na kraju treba naglasiti da se slična analiza može izvršiti i za antiferomagnetik sa proizvoljnim spinom. Tada spin-ske operatore treba izraziti preko kvazi-Pauli operatora (vidi formule A-18) i primeniti aproksimaciju (V.4.5) prilikom dekuplovanja viših kvazi paulionskih Grinovih funkcija.

Rezultati analiza koje su izvršene u ovoj glavi sažeto su prikazani u referenci [81].

Z A K L J U Č A K

Rezultati koji su dobijeni u disertaciji mogu se rezimirati na sledeći način:

a) Analiza termodynamičkih osobina feromagnetika u oblasti kritične temperature koja je vršena usavršenim metodom Tjablikova, pokazala je da u feromagneticima postoji mogućnost pojava većeg broja temperatura prelaza. Ovo je kompatibilno sa rezultatima analize iz [8] gde se na drugi način došlo do sličnog rezultata. Ponašanje krive magnetizacije koja je dobijena metodom haotičnih faza, ali sa egzaktnim zakonom disperzije za spinske talase (usavršeni metod Tjablikova), analizirano je numeričkim putem. Rezultati se kvalitativno uklapaju u neke eksperimente iz [61] i to za lantanidske feromagnetike.

b) Za feromagnetik sa dipolnim i izmenskim interakcijama predložen je metodološki korekstan tretman, koji se sastoji u stabilizaciji sistema (eliminacija linearnih članova iz hamiltonijana) i u eliminaciji efekata neodržanja spinskih talasa (članova u hamiltonijanu koji odgovaraju kreaciji, odnosno anihilaciji para pobudjenja). Ovako stabilisan hamiltonijan analiziran je metodima teorije perturbacije i na niskim temperaturama i u okolini temperature prelaza. Pokazano je da je na niskim temperaturama prva anharmonijska korekcija magnetizacije proporcionalna kvadratu apsolutne temperature. Takođe je pokazano da prisustvo dipolnih sila povećava temperaturu prelaza u odnosu na temperaturu prelaza za čist izmenSKI feromagnetik. Izračunate su verovatnoće dvo- i tromagnonske absorbcije. Za konkreten primer trikliničke strukture numerički su izračunati uglovi stabilisane ose kvantizacije.

c) Ispitivan je uticaj mehaničkih oscilacija na egzistenciju i karakteristike dopunskih pobudjenja koja se u sistemu spinskih talasa pojavljuju usled njihove kinematičke interakcije. Analize su vršene za slučaj malih koncentracija magnona i fonona i pokazano je, da se kinematički nivoi pojavljuju za visoke vrednosti talasnog vektora. Granična vrednost talasnog vektora posle koje se pojavljuju kinematički nivoi bitno zavisi od konstante magnon-fonon interakcije.

d) U hajzenbergovom antiferomagnetu izvršena je kvantna rotacija magnonskih stanja primenom Vajlovog identiteta i iz hamiltonijana su eliminisani oni delovi koji dovode do neodržanja broja pobudjenja. Ispitivana je energija osnovnog stanja rotiranog hamiltonijana i pokazano je da korekcije usled neodržanja mogu da iznose i do 35% od nekorigovane energije. Takodje je pokazano da je korigovana efektivna masa magnona skoro dvostruko veća od one mase koju daju računi u kojima se efekti neodržanja ne uzimaju u obzir. Analizirano je ponašanje magnetizacije na niskim temperaturama za spin proizvoljne veličine. Takodje je primenjen metod haotičnih faza na izučavanje antiferomagnetička sa spinovima $S = \frac{1}{2}$. Pokazano je, da korekcija magnetizacije pri $T = 0$ iznosi 12% one vrednosti koja se dobija ako efekti neodržanja ne eliminisemo. Ponašanje magnetizacije na visokim temperaturama, koje je dobijeno primenom simboličnog matričnog metoda u okviru aproksimacije haotičnih faza (formula V.4.3e), trebalo bi numerički analizirati, ali zbog nedostatka sredstava ovaj veoma skup kompjuterski račun nije izvršen.

Na kraju treba napomenuti, da neka istraživanja koja su u disertaciji izvršena mogu da posluže kao osnova za dalje analize i otkrivanja nekih novih efekata u magnetnim materijalima. To se u prvom redu odnosi na rezultate četvrte glave, gde bi se uopštavanje moglo izvršiti za slučaj visokih magnonskih i fononskih koncentracija. Ovakve analize doprinele bi razjašnjavanju do danas još ne sasvim jasnog mehanizma faznog prelaza. Takodje bi trebalo dalje razvijati pristup koji je izložen u glavi pet, s tim što bi se prilikom kvantne rotacije uzeo u obzir veći broj članova Vajlovog reda. Ovo bi dalo mogućnost korektnog tretmana antiferomagnetička sa visokim stepenom numeričke tačnosti.

D O D A T A K

Pauli i kvazi-Pauli operatori

Hamiltonijan (I.2.14) deluje u prostoru stanja koja su karakterisana spinskim talasnim funkcijama. Pošto nas u procesima koji se odigravaju u magnetnim interakcijama interesuju promene z projekcije, onda je očigledno da su spinske talasne funkcije u stvari svojstvene funkcije operatora z projekcije spina. Pošto za dati spin S, z projekcija može imati $2S + 1$ vrednost, onda je očigledno da su talasne funkcije za jedan atom u čvoru

$$|S\rangle, |S-1\rangle, |S-2\rangle \dots |S+2\rangle, |-S+1\rangle, |-S\rangle$$

Prema tome, Hilbertov prostor stanja za jedan čvor ima $2S + 1$ dimenziju. Pošto osnovno stanje feromagnetika definišemo kao stanje maksimalne vrednosti z projekcije, funkcija $|S\rangle_{\bar{n}}$ je funkcija osnovnog stanja za svaki od čvorova \bar{n} . Funkciju osnovnog stanja za celi kristal dobijamo kao produkt funkcija $|S\rangle_{\bar{n}}$ po svim čvorovima, tj.

$$|\text{osnovno stanje}\rangle = \prod_{\bar{n}} |S\rangle_{\bar{n}} \quad A-1$$

Operatori S^+ i S^- menjaju projekciju za jedinicu pa je

$$S^+ |S-m\rangle \sim |S-m+1\rangle$$

$$S^- |S-m\rangle \sim |S-m-1\rangle$$

Magnetne pojave mogu se matematički analizirati pomoću spinskih operatora koji deluju u prostoru obrazovanom od spinskih talasnih funkcija. Mi ćemo, međutim, u ovom radu sve analize vršiti ne pomoću spinskih operatora, već pomoću Pauli i kvazi-Pauli operatora. Razlog za ovo je činjenica da su pojave magnetizma u stvari pojave u elektronском подсистему кристала, при чему овај подсистем обраzuju само elektroni nepotpunjenih atomske ljudski. Pošto su Pauli - kvazi-Pauli opera-

tori konstruisani od kreacionih i anihilacionih elektronskih operatora, onda je jasno da ako uvedemo ove operatore, mi imamo jednu sliku feromagnetika koja je bliža realnoj situaciji, pa zato pri analizi uvek imamo bolju kontrolu fizičkih procesa nego ako radimo sa spinškim operatorima. Mi ćemo prvo uvesti pojam Pauli operatora i dati njihove osobine, a zatim ćemo uvesti opštije, kvazi-Pauli operator, i dati njihove komutacione relacije. Posle toga ostaje samo da se nadje korespondencija između spinških stanja i paulionskih i kvazi-paulionskih stanja, pa da se feromagnetik analizira u paulionskoj odnosno kvazi-paulionskoj slici.

Ako sistem fermiona ima na raspoloženju samo dva nivoa koji ćemo karakterisati kvantnim brojevima 0 (osnovno stanje) i 1 (pobudjeno stanje), onda Hilbertov prostor za ovakav slučaj sadrži samo četiri talasne funkcije i to:

$$|0_0 0_1\rangle ; |1_0 1_1\rangle ; |0_0 1_1\rangle ; |1_0 0_1\rangle$$

A-2

Ako su a_1 , a_1^+ , a_0 i a_0^+ obeležimo fermi operatori koji kreiraju i anihiliraju elektrone u stanjima 0 i 1, onda od svih fermi operatora možemo obrazovati sledeće operatori:

$$P^+ = a_1^+ a_0 \quad P = a_0^+ a_1$$

A-3

Štiji je fizički smisao, očigledan. Operator P^+ na osnovu definicije karakteriše proces u kome je nestao elektron u osnovnom stanju, a redio se elektron u pobudjenom stanju. Prema tome, operator P^+ se može shvatiti kao operator radjanja jednog kvanta eksitacije posmatranog sistema. Operator P kao što se vidi, opisuje proces u kome je isčezao elektron iz pobudjenog stanja i redio se u osnovnom stanju. Prema tomu, operator P je operator anihilacije jednog kvanta pobudjenja sistema.

Pošto za fermi operatori važe sledeće relacije:

$$a_0 |0_0\rangle = 0$$

$$a_1 |0_1\rangle = 0$$

$$a_0^+ |0_0\rangle = |1_0\rangle$$

$$a_1^+ |0_1\rangle = |1_1\rangle$$

$$a_0 |1_0\rangle = |0_0\rangle$$

$$a_1 |1_1\rangle = |0_1\rangle$$

$$a_0^\dagger |1_0\rangle = 0$$

$$a_1^\dagger |1_1\rangle = 0$$

A-4

Očigledno je da su operatori P^\dagger i P na stanjima $|0_0\ 0_1\rangle$ i $|1_0\ 1_1\rangle$ uvek ravni nuli, pa prema tome od celog prostora (I.3.2) ostaju kao aktuelna samo stanja $|1_0\ 0_1\rangle$ (osnovno stanje) i $|0_0\ 1_1\rangle$ (pobudjeno stanje). Očigledno je da u ovom podprostoru važi sledeća relacija:

$$a_0^\dagger a_0 + a_1^\dagger a_1 = 1$$

A-5

Na osnovu ovoga i komutacionih relacija za Fermi operatore, mi možemo da izvedemo komutacione relacije za Pauli operatore. Komutacione relacije za Fermi operatore su sledeće:

$$\{a_i, a_j^\dagger\} = \delta_{ij}, \quad \{a_i, a_j\} = \{a_i^\dagger, a_j^\dagger\} = 0$$

$$a_i^2 = a_i^\dagger a_i = 0$$

$a_i^\dagger a_i$ - ima svojstvene vrednosti

0 1 1

A-6

Potražićemo prvo antikomutator:

$$\begin{aligned} P^\dagger P + P P^\dagger &= a_1^\dagger a_0 a_0^\dagger a_1 + a_0^\dagger a_1 a_1^\dagger a_0 = \\ &= a_1^\dagger (1 - a_0^\dagger a_0) a_1 + a_0^\dagger (1 - a_1^\dagger a_1) a_0 = \\ &= a_1^\dagger a_1 + a_0^\dagger a_0 + a_1^\dagger a_0^\dagger a_0 a_1 + a_0^\dagger a_1^\dagger a_1 a_0 \end{aligned}$$

Pošto su u prostoru $|1_0\ 0_1\rangle$ i $|0_0\ 1_1\rangle$ poslednja dva operatora gornjeg izraza uvek ravni nuli ostaje, uz korišćenje formule (I.3.5), da je:

$$P^\dagger P + P P^\dagger = 1$$

A-7

A-7

Takodje je korisno naći vezu izmedju elektronskog i paulionskog okupacionog broja.

$$P^+P = a_1^+ a_0 a_0^+ a_1 = a_1^+ (1 - a_0^+ a_0) a_1 = a_1^+ a_1 - a_1^+ a_0^+ a_0 a_1$$

Znači:

$$P^+P = a_1^+ a_1$$

A-8

Dalje imamo:

$$P^2 = a_0^+ a_1 a_0^+ a_1 = -a_0^+ a_0^+ a_1 a_1 = -(a_0^+)^2 (a_1^+)^2 = 0$$

$$P^{+2} = a_1^+ a_0 a_1^+ a_0 = -a_1^+ a_1^+ a_0 a_0 = -(a_1^+)^2 (a_0^+)^2 = 0$$

Prema tome, za jedan čvor \bar{n} , Pauli operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$\left\{ R_{\bar{n}}, R_{\bar{n}}^+ \right\} = 1 \quad ; \quad R_{\bar{n}}^2 = R_{\bar{n}}^{+2} = 0 \quad ; \quad R_{\bar{n}}^+ R_{\bar{n}} = a_{1\bar{n}}^+ a_{1\bar{n}}^+$$

A-9

Može se pokazati na osnovu komutacionih relacija (I.1.6) da za različite čvorove Pauli operatori komutiraju u svim kombinacijama, pa prema tome, možemo konačno pisati da su komutacione relacije za Pauli operatore

$$\left[R_{\bar{n}}^2, R_{\bar{m}}^+ \right] = (1 - 2 R_{\bar{n}}^+ R_{\bar{n}}) \delta_{\bar{n}, \bar{m}} \quad ; \quad \left[R_{\bar{n}}, R_{\bar{m}} \right] = \left[R_{\bar{n}}^+, R_{\bar{m}}^+ \right] = 0$$

$$R_{\bar{n}} = R_{\bar{n}}^+ = 0$$

A-10

$$R_{\bar{n}}^+ R_{\bar{n}} = a_{1\bar{n}}^+ a_{1\bar{n}} = 0 \quad i \quad 1$$

Očigledno je da Pauli operatori imaju samo dva moguća stanja

$|0\rangle$ i $|1\rangle$. Ovoliko stanje imaju i spinski operatori za slučaj spina $S = 1/2$, tj. spinske talasne funkcije su $|1/2\rangle$ i $|-1/2\rangle$. Pošto su paulionski i spinski prostor istih dimenzija, možemo napraviti korespondenciju izmedju ova dva prostora.

$$|0\rangle \longrightarrow |\frac{1}{2}\rangle \quad |1\rangle \longrightarrow |-\frac{1}{2}\rangle$$

Kao što vidimo, paulionskom vakumu $|0\rangle$ odgovara spinsko osnovno stanje $|1/2\rangle$; pobudjenom paulionskom stanju $|1\rangle$ odgovara pobudjeno spinsko stanje $|-1/2\rangle$. Ovo odmah daje vezu izmedju spinskih i Pauli operatora.

$$P^+ = S^- \quad P = S^+$$

A-11

Pošto z projekcija u slučaju spina $S = 1/2$ uzima samo dve vrednosti i to $(+1/2)$ i $(-1/2)$, okupacioni paulionski broj takođe dve vrednosti 0 i 1 očigledno je da izmedju spinskih i Pauli operatora postoji još i ova veza:

$$\frac{1}{2} - S_z = P^+ P$$

A-12

Ako sistem fermiona ima raspoloženja $2S$ nivoa, onda je broj mogućih stanja ravan sumi binomskih koeficijenata binoma dgnutog na stepen $2S$, tj.

$$\text{Broj stanja} = \sum_{\nu=0}^{2S} \binom{2S}{\nu}$$

A-13

Od svih ovih stanja, ako usvojimo činjenicu da ako se jedan fermion nalazi u nekom stanju f_1 , onda se on ne može nalaziti i u nekom drugom stanju f_2 istovremeno, fizičkog smisla imaju samo sledeća stanja:

$$|1_0 \ O_1 \ O_2 \dots O_{2s} \rangle$$

A-14

$$|O_0 \ 1_1 \ O_2 \dots O_{2s} \rangle$$

$$|O_0 \ O_1 \ 1_2 \dots O_{2s} \rangle$$

$$|O_0 \ O_1 \ O_2 \dots 1_{2s} \rangle$$

Ako kreacione i anihilacione operatore elektrona obeležimo sa

$$a_o^+, a_o, a_1^+, a_1, a_2^+, a_2, \dots a_{2s}^+, a_{2s}$$

onda po analogiji sa prethodnim slučajem možemo uvesti operatore koji kreiraju kvante pobudjenja tipa 1, tipa 2, tipa 2S i to na sledeći način:

$$\mathcal{P}_1^+ = a_1^+ a_o \quad ; \quad \mathcal{P}_2^+ = a_2^+ a_o$$

$$\mathcal{P}_\mu^+ = a_\mu^+ a_o \dots \dots \dots \quad \mathcal{P}_{2s}^+ = a_{2s}^+ a_o$$

A-15

Odgovarajući anihilacioni operatori dati su sa

$$\mathcal{P}_1 = a_o^+ a_1 \quad ; \quad \mathcal{P}_2 = a_o^+ a_2$$

$$\mathcal{P}_\mu = a_o^+ a_\mu \dots \dots \dots \quad \mathcal{P}_{2s} = a_o^+ a_{2s}$$

A-16

Ovakvi operatori nazivaju se kvazi-Pauli operatori i za njih u prostoru (I.3.14) važe sledeće komutacione relacije:

Vidi referencu [2]

$$[\mathcal{P}_{\mu\bar{f}}, \mathcal{P}_{\nu\bar{g}}^+] =$$

$$= \delta_{\bar{f}\bar{g}} [\delta_{\mu\nu} (1 - \sum_{\omega=1}^{2s} \hat{N}_{\omega\bar{g}}^+) - \mathcal{P}_{\nu\bar{g}}^+ \mathcal{P}_{\mu\bar{g}}]$$

$$[\mathcal{P}_{\mu\bar{f}}, \mathcal{P}_{\nu\bar{f}}] = [\mathcal{P}_{\mu\bar{f}}^+, \mathcal{P}_{\nu\bar{g}}] = 0$$

A-17

$$\mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}, \mathcal{P}_{\nu\bar{\tau}} = \mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}^+, \mathcal{P}_{\nu\bar{\tau}}^+ = 0$$

$$\mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}, \mathcal{P}_{\nu\bar{\tau}} = 0 \quad (\mu \neq \nu) ; \quad \mathcal{P}_{0\bar{\tau}} = \mathcal{P}_{0\bar{\tau}}^+ = 1 \quad (\text{def})$$

Spinski operatori za spin $S > 1/2$ mogu se izraziti preko kvazi-Pauli operatora na sledeći način: (vidi referencu [3])

$$S_{\bar{\tau}}^+ = \sum_{\mu=1}^{2S} a_\mu \mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}^+ \mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}$$

$$S_{\bar{\tau}}^- = \sum_{\mu=1}^{2S} a_\mu \mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}} \mathcal{P}_{\mu-1\bar{\tau}}$$

$$S_{\bar{\tau}}^z = S - \sum_{\mu=1}^{2S} \mu \mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}^+ \mathcal{P}_{\mu\bar{\tau}}$$

A-18

$$a_\mu = [\mu(2S+1-\mu)]^{1/2}$$

$$a_{2S} + \mu = 0$$

$$\mu = 1, 2, \dots$$

Ovaj način izražavanja spinskih operatora preko kvazi-Pauli operatora, gde se u stvari svakoj promeni projekcije spina korresponira po jedan par operatora, čini fizičku sliku pojave u feromagnetiku daleko jasnijom. Kao što ćemo kasnije videti populacioni broj kvazi Pauliona tipa I koji odgovara promeni z projekcije spina od S na $S-1$ proporcionalan je $T^{3/2}$ (T - apsolutna temperatura), dok su populacioni brojevi os-

talih vrsta kvazi Pauliona proporcionalni

$$e^{-\frac{\text{const}}{K_B T}} = \frac{1}{e^{\frac{\text{const}}{K_B T}}} \rightarrow 0 \quad \text{za } T \rightarrow 0$$

i znači zanemarljivo mali na niskim temperaturama. Ovo tačno odražava fizičku sliku u feromagnetiku, jer je očigledno da se najlakše i sa najmanje energije može pobuditi prelaz iz S u S-1, dok ostali prelazi S u S-2 itd. zahtevaju mnogo više energije. Ova činjenica nalazi svoj odraz u napred navedenoj temperaturskoj zavisnosti populacionih brojeva kvazi pauliona.

S P I S A K L I T E R A T U R E

1. B.S.Tošić, Reprint JINR, R-4-588 Dubna, 1971.
2. B.S.Tošić, Phys.Stat.Sol.(b) 48, K129, 1971.
3. B.S.Tošić and M.M.Marinković, Phys.Letters 51A, 127, 1975.
4. M.M.Marinković, Phys.Stat.Sol.(b), 69, 291, 1975.
5. M.M.Marinković et.al., Physica 60C, 585, 1975.
6. S.V.Tjablikov, Metodi kvantne teorije magnetizma, "Nauka", 1965.
7. B.S.Tošić, M.M.Marinković, Phys.Stat.Sol.(b) 76, K 85, 1976.
8. B.S.Tošić, M.M.Marinković, S.Berar, Phys.Stat.Sol.(b) 81, 245, 1977.
9. E.H.Jakovljev, F.T.T 4, 594 (1962).
10. G.Leibfrid, Mikroskopska teorija mehaničkih i topločnih osobina kristala, Pyis.Mat.Giz., Moskva, 1963 (na ruskem).
11. E.Pytte, Ann.Phys.(N.Y) 32, 377 (1965).
12. V.G.Vaks, A.I.Larkin, ŽETF 42, 975 (1965).
13. H.S.Bennet, E.Pytte, Phys.Rev. 155, 553 (1967).
14. E.Pytte, H.S.Bennet, Phys.Rev. 164, 712 (1967).
15. H.S.Bennet, Phys.Rev. 185, 802 (1969).
16. A.I.Larkin, S.A.Pikin, ŽETF 56, 1664 (1969).
17. N.M.Plakida, Phys.Lett. 32A, 134 (1970).
18. G.Konvent, N.M.Plakida, TMF 2, 135 (1970).
19. V.N.Kaščejev, F.T.T. 13, 3400 (1971).
20. V.N.Kashcheev, Phys.Stat.Sol. 43, 51 (1971).
21. V.N.Kashcheev, Phys.Stat.Sol. 45, 57 (1971).
22. G.Konvent, N.M.Plakida, F.Vukalović, TMF 19, 115 (1974).
23. L.Onsager, Phys.Rev. 65, 117 (1944).
24. S.V.Vonsovski, E.A.Turcov, ŽETF 24, 419 (1953).
25. T.Holstein, H.Primakoff, Phys.Rev. 58, 1098 (1940).
26. L.Neel, Ann. de Phys. 17, 61 (1932).
27. L.Neel, Ann. de Phys. 5, 232 (1936).
28. L.Neel, Ann. de Phys. 2, 137 (1948).
29. F.Dyson, Phys.Rev. 102, 1217 (1956).
30. F.Dyson, Phys.Rev. 102, 1230 (1956).
31. F.Bloch, Zs.für Phys. 57, 545 (1929).
32. F.Bloch, Zs.für Phys. 61, 206 (1930).
33. F.Bloch, Zs.für Phys. 74, 295 (1932).
34. J. van Kranendonk, Physica 21, 81, 749, 925 (1955).

35. T.Oguchi, Progr.Theor.Phys. 17, 659 (1957).
 36. T.Oguchi, Phys.Rev. 117, 117 (1960).
 37. T.Oguchi, Progr.Theor.Phys. 25, 721 (1961).
 38. W.Opechowski, Physica 4, 181 (1937).
 39. W.Opechowski, Physica 25, 476 (1960).
 40. S.V.Tjablikov, DAN SSSR, 149, 573 (1963).
 41. S.V.Tjablikov, FMM, 15, 641 (1963).
 42. S.V.Tjablikov, FMM, 15, 801 (1963).
 43. S.V.Tjablikov, FMM, 16, 321 (1963).
 44. S.V.Tjablikov, FMM, 17, 283 (1964).
 45. S.V.Tjablikov, V.L.Bonč-Bruevič, Metod funkcije Grina u statističkoj mehanici GIFML, Moskva (1961).
 46. S.T.Dembinski, Physica 30, 1217 (1964).
 47. S.V.Maljejev, ŽETF, 33, 1010 (1957).
 48. I.Oktenburger, Phys.Rev. 136, A1374 (1963).
 49. S.V.Tjablikov, E.M.Sorokina, FMM 24, 200 (1967).
 50. M.L.Kulić, B.S.Tošić, Phys.Stat.Sol.(b) 54, K79 (1973).
 51. R.A.Tahir-Kheli, D.ter Haar, Phys.Rev. 127, 88 (1962).
 52. R.A.Tahir-Kheli, D.ter Haar, Phys.Rev. 127, 95 (1962).
 53. A.C.Hewson, D.ter Haar, preprint broj 121/63 Clarendon Lab. Oxford 35, 42 (1963).
 54. A.C.Hewson, D.ter Haar, preprint, Clarendon Lab. Oxford 42 (1963).
 55. A.C.Hewson, D.ter Haar, Phys.Lett. 6, 136, 7 (1963).
 56. R.B.Žakula, D.I.Lalović, Phys.Stat.Sol. 40 235 (1970).
 57. R.Djordjević, S.D.Stojanović, R.B.Žakula, I.Low Temp.Phys. 6, 287 (1972).
 58. L.M.Noskova, FMM 35, 254 (1973).
 59. V.M.Agranović and B.S.Tošić, ŽETF, 53, 149 (1967).
 60. D.I.Lalović, B.S.Tošić i Žakula, Phys.Rev. 178, 1472 (1969).
 61. K.P.Belov, M.A.Beljančikova, R.Z.Levitin i S.A.Nikitin, Fero i antiferomagnetizam retkih zemalja, Nauka, Moskva, (1965) (na ruskom)
 62. A.H.Cooke, D.T.Edmonds, C.B.P.Finn, W.P.Folf, Proc.Phys.Soc. 74, 791 (1959).
 63. B.Nikin, B.S.Tošić, and V.M.Zeković, Phys.Stat.Sol.(b) 65, 449 (1974).
 64. G.Knežević, B.Nikin, B.S.Tošić, Physica A (1977).
 65. S.D.Stojanović, M.J.Škrinjar, B.S.Tošić, Phys.Lett. 59A 396 (1976).

66. Kapor, Stojanović, Škrinjar-Tošić (Phys.Stat.Sol 1976)
67. L.Hulten, Proc.Roy.Acad.Sci.Amsterdam, 39, 190 (1936).
68. S.V.Tjablikov, FMM 2, 3 (1956).
69. S.V.Tjablikov, FMM 2, 193 (1956).
70. V.E.Rode, A.V.Vedjajev, ŽETF, 45, 415 (1963).
71. B.Nikin, M.M.Marinković, Physica A (1978).
72. J.H.Van Vleck, J.Chem.Phys. 9, 85 (1941).
73. P.W.Anderson, Phys.Rev. 79, 705 (1950).
74. J.H.Van Vleck, J.de Phys. et Radium 12, 262 (1951).
75. Li Yin Yuan, Phys.Rev. 80, 457 (1950).
76. J.M.Luttinger, Phys.Rev. 81, 1015 (1951).
77. J.S.Smart, Phys.Rev. 86, 968 (1952).
78. J.S.Smart, Phys.Rev. 90, 55 (1962).
79. N.N.Bogoljubov, S.V.Tjablikov, Vestnik MGU, 3, 35 (1949).
80. E.A.Turov, J.P.Irhin, Izv. AN SSSR, 22, 1168 (1958).
81. R.Maksimović, M.M.Marinković, B.Nikin, B.S.Tošić (u štampi
1978, Physica NHPC Amsterdam).