U N I V E R Z I T E T U N O V O M S A D U

PRIRODNO MATEMATIČKI FAKULTET

Institut za fiziku

Farkaš Ildiko

OSNOVNO STANJE ANTIFEROMAGNETIKA

- diplomski rad -

Novi Sad 1977.

Zahvaljujem se mentoru
profesoru Dr Bratislavu S. Tošiću
na pomoći u izboru, vođenju i usmeravanju rada pri izradi i pisanju ove teme.

S A D R Ž A J

U V O D

Cilj ovog diplomskog rada je da se ispituju efekti neodržanja broja kvazičestica u antiferomagneticima. Poznata je činjenica da energija osnovnog stana antiferomagnetika, određena klasičnim metodama izbora onog pravca ose kvantizacije koji daje minimalnu energiju osnovnog stanja, uglavnom ne zadovoljava postojeće eksperimentalne činjenice i da teorijski dobijeni rezultati uvek daju veću energiju osnovnog stanja nego što se oni dobijaju eksperimentalno. U radu će biti izvršen pokušaj da se nađe korektniji izraz za energiju osnovnog stanja, nego što to daje napred pomenuti klasičan prilaz. U tom cilju, pored već uobičajene klasične rotacije sistema, biće izvršena i dopunska, kvantna rotacija sistema, čiji će zadatak biti da u maksimalno mogućoj meri eliminiše one činioce materijala feromagnetika koji prouzrokuju neodržanje pobuđenja. Energija osnovnog stanja koja se dobija posle ove druge rotacije, trebalo bi da se bolje slaže sa onim vrednostima koje se očekuju na bazi eksperimentalnih istraživanja.

I GLAVA

O P S T E O M A G N E T I Z M U

1. Magnetni materijali i njihove osobine

Prema magnetnim svojstvima čvrsta tela se dele na slabe i jake magnetne materijale. Jaki magnetni materijali su fero, feri i antiferomagnetici. Feromagnetici i ferimagnetici se karakterišu postojanjem velikog makroskopskog momenta u uzorku, koji je pod određenim uslovima rezultat specifičnog magnetnog uređenja.

Tipični predstavnici feromagnetika su prelazni metali,(Fe, Co, Ni, Pt, Cr, Mn), zatim neki elementi iz grupe retkih zemalja (Ce, Nd,Sm, Ed, Tb, Cd, Ho, Er, Dy, Tu) i legure Fe, Co, Ni. Predstavnici ferimagnetika su kompleksne soli prelaznih metala MnO, Fe_2O_3, a predstavnici antiferomagnetika su soli i oksidi prelaznih metala FeO, CoF_2, $NiSO_4$.

Jaki magnetni materijali su kristali čija je kristalna rešetka sastavljena od atoma sa nepopunjenim unutrašnjim nivoima. Osobine jakih magnetnih materijala uslovljene su elektronima nepopunjenih nivoa i zavise od raspodele gustine provodnih elektrona.No, to svakako ne znači da se na osnovu elektronskih konfiguracija slobodnih elektrona može formulisati neophodan i dovaljan uslov za postojanje jakog magnetizma, jer, kako je poznato, svi prelazni elementi imaju nepopunjene unutrašnje nivoe i najčešće su paramagnetici (feromagnetici su samo Fe, Co, Ni).

Žiromagnetni odnos, tj. odnos magnetnog momenta prema mehaničkom, u jedinicama $\frac{e}{2mc}$ jednak je 2 za sopstveni moment elektrona, a 1 za orbitalni, te se može uzeti da je doprinos orbitalnih momenata mali i da se makroskopski moment sastoji samo od magnetnih momenata elektrona nepopunjenih nivoa, i to uz pretpostavku da je rezultujući magnetni moment uslovljen, pri određenim uslovima, spinskim uređenjem elektrona nepopunjenih nivoa. Uzrok pojave tog uređenja je interakcija elektrona. Takav model su predložili Frenkel i Hajzenberg i on je osnova savremene kvantne teorije jakog magnetizma.

Jačina magnetne polarizacije ili magnetizacije ili magnetni moment jedinice zapremine, pri temperaturama nižim od jedne kritične, je spontana magnetizacija. Spontana magnetizacija je funkcija temperature i gotovo ne zavisi od primenjenog polja. Njena najveća vrednost je magnetizacija zasićenja. Jaka magnetna svojstva su zapažena samo kod kristala. Uticaj kristalne strukture na magnetna svojstva ogleda se u postojanju magnetno kristalne anizotropije. U kristalima postoji samo nekoliko pravaca duž kojih orijentacija spinova daje minimalan termodinamički potencijal. Ti pravci se nazivaju pravcima lakog namagnetisanja. Gvožđe, koje ima kubnu zapreminski centriranu kristalnu rešetku, ima pravce lakog namagnetisanja duž ivica kocke. U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja, energetski najpovoljniji raspored spinova, u monokristalu, je onaj kada je monokristal podeljen na niz oblasti u kojima su spinovi usmereni u jednom pravcu. Veličine i međusobni položaj ovih oblasti spontane magnetizacije određen je uslovom minimuma termodinamičkog potencijala.

Pri određenim uslovima se može ponašanje elektrona iz nepopunjenih nivoa opisati sistemom spinova raspoređenim u čvorovima rešetke. Interakcija spinova naziva se integralom izmene. Smatra se da je integral izmene po redu veličine jednak energiji razmene elektrona odgovarajućih čvorova. No, račun je i sa ovako uprošćenim modelom složen. Nekada se spinovi mogu zameniti klasičnim vektorima i tada se model posmatra kao sistem dipola, vezanih energijom veličine energije razmene. Ta, tzv. klasična šema, dozvoljava da se daju dosta dobri kvalitativni rezultati, a donekle i kvantitativni. Sam model se može još uprostiti ako se interakcija magnetnih momenata zameni sa efektivnim poljem, koji je proporcionalan integralu razmene i srednjoj magnetizaciji. Ako je N broj atoma u jedinici zapremine, a μ magnetni moment atoma, onda je magnetizacija zasićenja:

$$M_0 = N\mu \quad . \tag{1.1}$$

Izmerene vrednosti su manje, a razlika je uslovljena toplotnim oscilovanjem spinskih momenata atoma, anizotropijom i efektom krajeva uzoraka. Ako se uzorak smesti u spoljašnje magnetno polje $\mathcal{H}$ magnetizacija raste. Veličina

$$\chi(\mathcal{H}) = \frac{\partial M}{\partial \mathcal{H}} \tag{1.2}$$

je magnetna susceptibilnost.

Na temperaturama na kojima je srednja toplotna energija reda veličine integrala razmene, narušava se uređenost spinova. Ta temperatura se za feromagnetike naziva Kirijeva temperatura i reda je veličine $\sim 10^3$ [°K], integral razmene je $\sim 10^{-13}$ [erg], a energija magnetne anizotropije je uporediva sa energijom magnetnih interakcija elektrona.

2. Hajzenbergov model feromagnetika

U prelaznim metalima (Fe, Co, Ni) koji su feromagnetni i u lantanidima, koji mogu biti fero, feri i antiferomagnetni, nosioci magnetnih osobina su elektroni nepopunjene 3d, odnosno 4f ljuske. Najprostiji model za opisivanje feromagnetnih osobina kristala je Hajzenbergov izotropni model. Hamiltonijan ovog modela invarijantan je u odnosu na grupu rotacije i predstavlja sumu skalarnih proivoda spinova na dva razna čvora rešetke. U opštem slučaju Hamiltonijan ima oblik:

$$H = -\mu\mathcal{H}\sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} I_{\vec{m}\vec{n}}\, \vec{S}_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{m}} \tag{1.3}$$

gde je μ - magnetni moment atoma, $\mathcal{H}$ - spoljašnje magnetno polje, $\vec{n}$, $\vec{m}$ - vektori kristalne rešetke, $\vec{S}$ -operator spina i $I_{\vec{n}\vec{m}}$ - -tzv. integrali razmene koji u teoriji ulaze kao fenomenološki parametri; kao osa kvantizacije uzeta je z osa.

Osnovno stanje kristala definisano je relacijom:

$$\sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} |0\rangle = NS|0\rangle \tag{1.4}$$

gde je N ukupan broj atoma u kristalu, a S maksimalni efektivni spin svakog od atoma rešetke. Drugim rečima, u osnovnom stanju svi spinovi su orijentisani u pravcu ose kvantizacije.

Operatori spina:

$$S^{\pm}_{\vec{n}} = S^x_{\vec{n}} \pm i S^y_{\vec{n}} ; \; i \; S^z_{\vec{n}}$$

zadovoljavaju sledeće komutacione relacije:

$$\begin{aligned} [S^+_{\vec{n}}, S^-_{\vec{m}}] &= 2S^z_{\vec{n}}\,\delta_{\vec{n}\vec{m}} \\ (S^+_{\vec{n}})^{2S+1} &= (S^-_{\vec{n}})^{2S+1} = 0 \\ \{S^+_{\vec{n}}, S^-_{\vec{n}}\} &= 2S(S+1) - 2(S^z_{\vec{n}})^2 \end{aligned} \tag{1.5}$$

Odavde je očigledno da spinski operatori nemaju ni bozonsku ni fermionsku kinematiku, pa se zbog toga kao prva teškoća pri izračunavanju termodinamičkih veličina feromagneta pojavljuje problem statistike spinskih operatora. Osim toga, pri kvantnomehaničkom rešavanju problema u čvrstom telu gotovo je uvek neophodno izračunati fizičke veličine u prostoru recipročne rešetke, što opet zahteva potrebu Furije transformacija, koje za spinske operatore nisu kanonične, tj. ne odražavaju komutacione relacije. Te teškoće su dovele do mogućih diskusija o tome koji je najpravilniji način za teorijsko ispitivanje Hajzenbergovog feromagnetika.

Prvi pokušaj u tom smislu su učinili Holstejn i Primakof koji su spinske operatore predstavili pomoću boze operatora i umesto Hajzenbergovog feromagnetika analizirali su ekvivalentni bozonski sistem. Formule Holstejna i Primakofa dobro reprodukuju kinematiku spinskih operatora u bozonskom prostoru samo za ona bozonska stanja čiji okupacioni brojevi leže između 0 i 2S. Ni danas nije jasno kakvu grešku unose u račun tzv. " nefizička stanja ", tj. ona bozonska stanja čiji su okupacioni brojevi veći od 2S. Sve ove nejasnoće se odnose isključivo na efekte interakcije elementarnih ekscitacija u feromagnetu. Što se tiče harmonijske aproksimacije ne postoji nikakva dilema. Bloh je pokazao, da ako se spinski operatori zamene Boze operatorima po formuli:

$$S^{+}_{\vec{n}} = B^{-}_{\vec{n}}\sqrt{2S} \qquad S^{-}_{\vec{n}} = B^{+}_{\vec{n}}\sqrt{2S} \qquad S^{z}_{\vec{n}} = S - B^{+}_{\vec{n}}B^{-}_{\vec{n}} \tag{1.6}$$

tako da se za pravilan harmonijski zakon disperzije za magnone dobija:

$$\begin{aligned} E_{\vec{k}} &= \mu\mathcal{H} + S(J_0 - J_{\vec{k}}) \\ J_{\vec{k}} &= \sum_{\vec{m}} I_{0\vec{m}}\, e^{i\vec{k}\vec{m}} \end{aligned} \tag{1.7}$$

U slučaju da je $\mathcal{H}=0$ i za zakon disperzije (1.7) kvadratni po $\vec{k}$, pri niskim temperaturama za magnetizaciju

$$\sigma = \frac{\langle S^{z}_{\vec{n}} \rangle}{S} \tag{1.8}$$

dobijamo poznati Blohov zakon " $T^{3/2}$ ", gde je T apsolutna temperatura:

$$\sigma = 1 - \frac{1}{S}\left(\frac{KT}{\frac{2}{3}\bar{u}SJ_0}\right)^{3/2} \zeta(3/2)$$

$$\zeta(p) = \sum_{n=1}^{\infty} n^{-p} \qquad (1.9)$$

Mnogi su autori izračunali korekcije koje u Blohov zakon (1.9) unose anharmonijski efekti sistema magnona. Tako su na primer Kramers i Opehovski našli da je sledeći član u formuli (1.9) reda T^2. Primenjujući formulu Holstejna i Primakofa, Šafrot nalazi da je popravka reda $T^{7/4}$ sa pozitivnim koeficijentom, dok Van Kranendok, pomoću svoje bozonske reprezentacije spinskih operatora, dobija popravku reda $T^{7/4}$, ali sa suprotnim znakom i drugom brojnom vrednošću.

Fundamentalnu teoriju niskotemperaturskih procesa u Hajzenbergovom feromagnetu dao je Dajson. On pokazuje da Blohova formula za magnetizaciju ima kor-ekcije dva tipa, i to: članove proporcionalne $T^{5/2}$ i $T^{7/2}$ koji potiču od viših stepena talasnog vektora $\vec{k}$ po kojem se razvija zakon disperzije (1.7) i popravku proporcionalnom T^4 i istog znaka, koja dolazi od anharmonijskih magnetnih efekata. Korektna Dajsonova formula za magnetizaciju pri niskim temperaturama glasi:

$$\sigma = \sigma_{Bl} + \sigma_{Anh} \qquad (1.10)$$

$$\sigma_{Bl} = 1 - \frac{1}{S}\left\{\zeta(\tfrac{3}{2})\tau^{3/2} + \tfrac{3}{4}\bar{u}\,\zeta(\tfrac{5}{2})\tau^{5/2} + \bar{u}^2\,\tfrac{33}{32}\zeta(\tfrac{7}{2})\tau^{7/2} + \cdots\right\} \qquad (1.11)$$

$$\sigma_{Anh} = -\frac{1}{S}\,6\bar{u}\,\zeta(\tfrac{3}{2})\zeta(\tfrac{5}{2})\tau^4 \quad ; \quad \tau = \frac{KT}{\frac{2}{3}\bar{u}SJ_0} \qquad (1.12)$$

Zakon disperzije za magnone je:

$$E^{Dis}_{\vec{k}} = E_{\vec{k}} + \frac{1}{N}\sum_{\vec{q}}\left(J_{\vec{k}} + J_{\vec{q}} - J_0 - J_{\vec{k}-\vec{q}}\right)N_{\vec{q}} \qquad (1.13)$$

gde je

$$N_{\vec{q}} = \frac{1}{e^{E_{\vec{q}}/\theta} - 1} \qquad \theta = KT \qquad (1.14)$$

Navedene rezultate Dajson je dobio koristeći nehermitsku bozonsku reprezentaciju za spinske operatore

$$S^z_{\vec{n}} = S - B^+_{\vec{n}} B^-_{\vec{n}} \quad ; \quad S^+_{\vec{n}} = \sqrt{2S}\, B_{\vec{n}} - \frac{1}{\sqrt{2S}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} B_{\vec{n}}$$

$$S^-_{\vec{n}} = \sqrt{2S}\, B^+_{\vec{n}} \tag{1.15}$$

Osnovni deo Dajsonove teorije predstavlja dokaz da oni procesi u feromagnetu, koji nastaju kao rezultat sudara dve ekscitacije na jednom čvoru rešetke, unose u sve termodinamičke veličine, karakteristične za Hajzenbergov feromagnet, eksponencijalno male popravke srazmerne $e^{const/kT}$, pa su kao takvi irelevantni na niskim temperaturama. Zbog ovog je reprezentacija (1.15), mada nehermitska, efektivno dobra, jer svi oni članovi koji bi je dopunili tako da postane hermitska, dali bi, posle zamene u Hamiltonijan (1.3), popravke koje odgovaraju procesima sudara tri magnona na jednom čvoru.

3. Ostale magnetne strukture

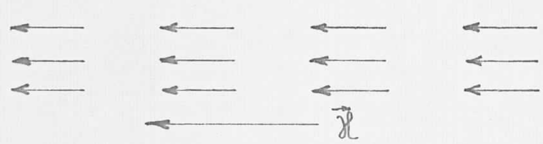
U razvoju teorije magnetizma stvarali su se različiti modeli jakih magnetnih materijala:

a) model prema kome se jaki magnetni materijali uzimaju kao sistem spinova raspoređenih u čvorovima rešetke.

Ako se zanemari uticaj magnetne anizotropije i ako se koriste kvazi klasične aproksimacije, modeli jakih magnetnih materijala se mogu posmatrati odvojeno, svaki za sebe, i izgledali bi ovako:

Feromagnetici

Pri temperaturama koje su niže od Kirijeve tačke svi spinovi u proseku su orijentisani u jednom pravcu, te je rezultujući magnetni moment znatan. U odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja pravac rezultujućeg magnetnog momenta nije fiksiran. Ako postoji i vrlo slaba anizotropija, vektor $\vec{M}$ je duž jedne od osa lake magnetizacije orijentisan. Ako se feromagnet nađe u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{\mathcal{H}}$, vektori $\vec{M}$ i $\vec{\mathcal{H}}$ postaju kolinearni,(sl.1).



sl.1

Na Kirijevoj temperaturi nestaje spontana magnetizacija, a za visoke temperature feromagnetik se ponaša slično klasičnom paramagnetu, dok je njegova susceptibilnost određena Kiri-Vajsovim zakonom:

$$\chi = \frac{const}{T - T_c} \qquad (1.16)$$

Spontana magnetizacija za $T \leq T_c$ određena je izrazom:

$$M(T) = const \sqrt{1 - T/T_c} \qquad (1.17)$$

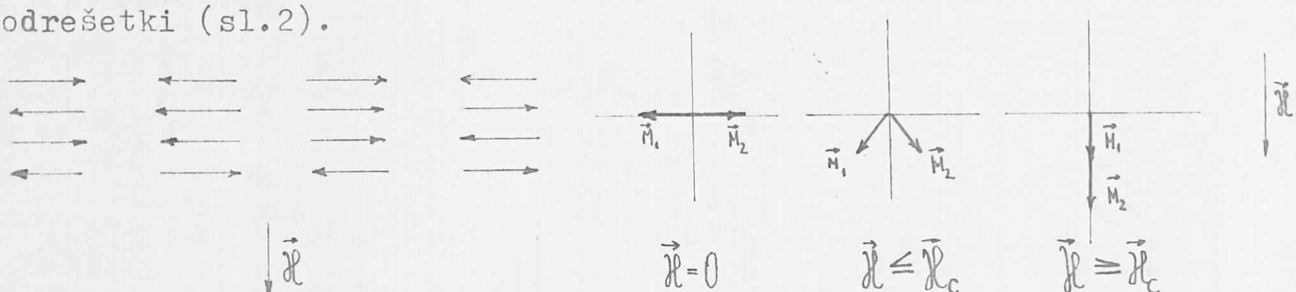
pri $T \to 0$

$$M(T) = M_0(1 - A_1T^{3/2} - A_2T^{5/2} - \cdots) \qquad (1.18)$$

gde su A_i konstante, a M_0 magnetizacija zasićenja.

Antiferomagnetici

Prema hipotezi Nela kod antiferomagnetika se raspored spinova može predstaviti kao sprega dve ili više feromagnetnih podrešetki (sl.2).



sl.2

Pri $\vec{\mathcal{H}}=0$ rezultujuća magnetizacija je nula; pri polju, koje je manje od nekog kritičnog, rezultujuća magnetizacija je kolinearna sa poljem; pri $\vec{\mathcal{H}}\geq\vec{\mathcal{H}}_c$ magnetizacija podrešetki je u pravcu polja i u ovom slučaju se antiferomagnetik ponaša kao feromagnetik.

Kao i feromagnetici i antiferomagnetici se pri $T > T_n$ ponašaju kao paramagnetici, (T_n je Nelova temperatura).

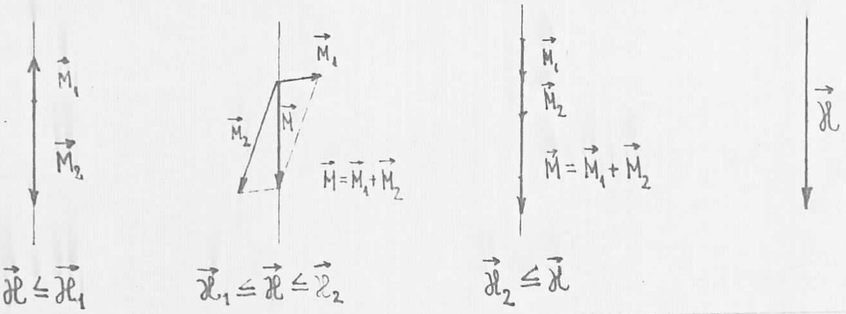
Opšte karakteristike antiferomagnetika su još maksimum susceptibilnosti pri $T=T_n$, stroga zavisnost susceptibilnosti od temperature i veći uticaj anizotropije nego što je to bio kod feromagnetika.

Slabi feromagnetici

Ova grupa magnetnih materijala, koji se zovu još i antiferomagnetici sa slabim feromagnetizmom, čine prelaz između dve opisane vrste i kod njih je pri $\vec{\mathcal{H}}=0$ $\vec{M}\neq0$, što je uslovljeno anizotropijom i ne strogom paralelnošću spinova podrešetki.

Ferimagnetici

Za ferimagnetike je karakteristično postojanje nekoliko podrešetki sa rezultujućim magnetnim momentom različitim od nule, koji potiče usled različitog broja " levih " i " desnih " čvorova, različitih veličina spinova, kao i nekolinearnog rasporeda momenata podrešetki. Ponašanje ferimagnetika u spoljašnjem magnetnom polju $\vec{\mathcal{H}}$ prikazano je na slici 3.



sl.3

Na slici su uzete samo dve podrešetke sa rezultujućim momentima $\vec{M}_1$ i $\vec{M}_2$, a $\vec{\mathcal{H}}_1$ i $\vec{\mathcal{H}}_2$ su kritične vrednosti magnetnog polja. Zanemarena je magnetna anizotropija. Broj podrešetki može da bude i veći. Kod tih ferimagnetika spontana magnetizacija može da padne na nulu, pre Kirijeve tačke i to je tzv. temperatura kompenzacije, a rezultat je različite temperaturne zavisnosti magnetizacija podrešetki koje se u jednom trenutku kompenzuju. Više od te tačke, kompenzacija se narušava, a rezultujući moment isčezava na Kirijevoj tački. Na višoj temperaturi od Kirjeve tačke ferimagnetici se ponašaju kao paramagnetici, a zavisnost susceptibilnosti od temperature data je Kiri-Nelovim zakonom:

$$\chi^{-1} = \chi_0^{-1} + \frac{T}{C} - \frac{\Delta}{T-T_c} \tag{1.19}$$

χ_0, Δ, i C su konstante.

Mogući tipovi magnetnih struktura ne iscrpljuju se u ovim prostim slučajevima. U nizu materijala opažaju se tzv. spiralne strukture, kod kojih se komponente spinova periodično menjaju pri pomeranju duž nekog kristalografskog pravca. Po pravilu imaju jednu osu simetrije. Kod ovih struktura moguć je prelaz iz jednog oblika u drugi, a sem toga nije lako napraviti njihovu klasifikaciju. Materijali ovog tipa strukture, na primer neke retke zemlje, imaju dve niskotemperaturne faze: pri jako niskim temperaturama odlikuju se feromagnetnim svojstvima, a pri višim antiferomagnetnim. U skladu sa tim imaju dve tačke faznih prelaza: na nekoj karakterističnoj temperaturi T_1 dešava se prelaz iz feromagnetnog stanja u antiferomagnetno stanje, a opet na temperaturi T_2 u paramagnetno stanje.

Kako ovaj model, prema kome se jaki magnetni materijali uzimaju kao sistem spinova raspoređenih u čvorovima rešetke, daje i takve rezultate koje ne odgovaraju eksperimentalnim, stvorena je nova teorija- teorija zona magnetizma.

b) Teorija zona magnetizma objašnjava necelobrojnost magnetnih momenata i anomalno velike atomske toplotne kapacitete metala sa nepopunjenom 3d ljuskom. Ova teorija uveličava efekat kolektivizacije elektrona nepopunjenih nivoa, te ne može da objasni znatanbroj magnetnih svojstava.

c) Hibridni model ili s-d model razmene uzima interakciju valentnih elektrona sa lokalizovanim spinovima kao malu perturbaciju.

4. Interakcija sa fononima i s-d interakcija

U zamrznutoj rešetci (T = 0) Hamiltonijan sistema spinova ima oblik:

$$H = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})\vec{S}_{\vec{n}}\vec{S}_{\vec{m}} \tag{1.20}$$

Ako vektor spina razložimo na komponente

$$\vec{S} = S^x\vec{i} + S^y\vec{j} + S^z\vec{k} = \frac{S^+ + S^-}{2}\vec{i} + \frac{S^+ - S^-}{2i}\vec{j} + S^z\vec{k}$$

onda Hamiltonijan (1.20) postaje:

$$H_s = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})S^-_{\vec{n}}S^+_{\vec{m}} - \frac{1}{2}\sum_{\vec{n}\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m})S^z_{\vec{n}}S^z_{\vec{m}} \tag{1.21}$$

Ukoliko zbog povišenja T ili bilo kog drugog razloga dođe do oscilovanja molekula onda možemo uzeti da je

$$\vec{n} \to \vec{n} + \vec{\xi}_{\vec{n}} \quad ; \quad \vec{m} \to \vec{m} + \vec{\xi}_{\vec{m}} \tag{1.22}$$

gde su $\vec{\xi}_{\vec{n}}$ i $\vec{\xi}_{\vec{m}}$ operatori molekulskog pomeraja, koji se preko fotonskih operatora $b_{\vec{k}j}$ i $b^+_{\vec{k}j}$ mogu izraziti na sledeći način:

$$\vec{\xi}_{\vec{n}} = \sum_{\vec{q}j} \sqrt{\frac{\hbar}{2MN\omega_{\vec{q}j}}}\, \vec{l}_{\vec{q}j}\left(b_{\vec{q}j} + b^+_{-\vec{q}j}\right) e^{i\vec{q}\vec{n}} \tag{1.23}$$

S obzirom na prelaz (1.22) i činjenicu da su molekulski pomeraji mali u odnosu na veličinu pomeraja rešetke, za integral izmene u rešetci koja osciluje, možemo pisati sledeće:

$$I(\vec{n}-\vec{m}) \to I\left[(\vec{n}-\vec{m}) + (\vec{\xi}_{\vec{n}} - \vec{\xi}_{\vec{m}})\right] \approx I(\vec{n}-\vec{m}) + (\vec{\xi}_{\vec{n}} - \vec{\xi}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m}) \tag{1.24}$$

Drugi član u (1.24) daje Hamiltonijan spin fononske interakcije tako da s obzirom na (1.24) i (1.21) možemo pisati:

$$H_{SP} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} (\vec{\xi}_{\vec{n}} - \vec{\xi}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m}) S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} - \tag{1.25}$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec{n},\vec{m}} (\vec{\xi}_{\vec{n}} - \vec{\xi}_{\vec{m}})\nabla_{\vec{n}-\vec{m}} I(\vec{n}-\vec{m}) S^z_{\vec{n}} S^z_{\vec{m}}$$

Ukoliko iskoristimo formulu (1.23) i sledeće Furije transformacije:

$$I(\vec{n}-\vec{m}) = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} J(\vec{k})\, e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})} \; ; \quad J(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} I(\vec{l})\, e^{-i\vec{k}\vec{l}} \; ; \quad \vec{l}=\vec{n}-\vec{m}$$

$$S^-_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} S^-_{\vec{k}}\, e^{-i\vec{k}\vec{n}} \; ; \quad S^+_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} S^+_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{n}} \qquad (1.26)$$

$$S^z_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}}{}' S^z_{\vec{k}}\, e^{-i\vec{k}\vec{n}} \; ; \quad S^z_{\vec{m}} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}} S^z_{-\vec{k}}\, e^{i\vec{k}\vec{m}}$$

onda se H_{SP} svodi na sledeći oblik

$$H_{SP} = \frac{i}{2}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}\vec{q}j}\sqrt{\frac{\hbar}{2M\omega_{\vec{q}j}}}\left\{(\vec{k}\vec{l}_{\vec{q}j})J(\vec{k}) - \left[(\vec{k}-\vec{q})\vec{l}_{\vec{q}j}\right]\times J(\vec{k}-\vec{q})\right\}\left(S^-_{\vec{k}}S^+_{\vec{k}-\vec{q}} + S^z_{\vec{k}}S^z_{\vec{q}-\vec{k}}\right)\left(b_{\vec{q}j} + b^+_{-\vec{q}j}\right) \qquad (1.27)$$

U ovom obliku se H_{SP} najčešće koristi u računanju. Treba ipak naglasiti da izraz (1.27), zbog toga što smo se u razvoju (1.24) zadržali na linearnim članovima po fononskim pomerajima, važi u oblasti niskih temperatura kada su pomeraji mali.

- - -

S-d model je postavio S.V. Vonsovski, a u njemu se razmatraju dve grupe nivoa elektronskog sistema: d (ili f) nivoi elektrona unutrašnjeg nepopunjenog oblika i s - nivoi valentnih elektrona. Uzajamno dejstvo medju elektronima ovih nivoa razmatramo kao malo pobudjenje. Po ovom modelu prisutnost nepopunjenih nivoa sa nekompenzovanom vrednošću rezultujućeg magnetnog momenta spina je uzrok pojave feromagnetizma. Sa ovim pretpostavkama Hamiltonijan ovog sistema može biti napisan kao

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_{sd} = \hat{H}_{dd} + \hat{H}_{ss} + \hat{H}_{sd} \qquad (1.28)$$

gde je H_{dd}- operator energije interakcije d- elektrona, H_{ss}- s- elektrona i H_{sd}- operator energije uzajamnog dejstva s- i d- elektrona, i dati su sa:

$$H_{dd} = -\frac{1}{2}\sum_{f_1 f_2} I(f_1,f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}) \; ; \quad H_{ss} = \sum_{\nu,\sigma} E_{\nu\sigma} a^{+}_{\nu\sigma} a_{\nu\sigma} \; ;$$

$$H_{sd} = -\frac{1}{2N}\sum_{\nu,f} B(\nu_1-\nu_2)\, e^{-i(\nu_1-\nu_2, f)} \times \Big\{ S^z_f \big(a^{+}_{\nu_1,-\frac{1}{2}} a_{-\nu_2,-\frac{1}{2}} -$$

$$- a^{+}_{\nu_1,\frac{1}{2}} a_{\nu_2,\frac{1}{2}}\big) + S^x_f \big(a^{+}_{\nu_1,-\frac{1}{2}} a_{\nu_2,\frac{1}{2}} + a^{+}_{\nu_1,\frac{1}{2}} a_{\nu_2,-\frac{1}{2}}\big) + \qquad (1.29)$$

$$+ i S^y_f \big(a^{+}_{\nu_1,\frac{1}{2}} a_{\nu_2,-\frac{1}{2}} - a^{+}_{\nu_1,-\frac{1}{2}} a_{\nu_2,\frac{1}{2}}\big)\Big\}$$

gde je S_f - operator spina elektrona koji pripada čvoru f, $a^{+}_{\nu\sigma}$ i $a_{\nu\sigma}$ ($\sigma = \pm\frac{1}{2}$) - fermi operatori kreacije i anihilacije s - elektrona u stanju sa talasnim vektorom ν i spinom σ , $E_{\nu\sigma}$ - energija elektrona u stanju (ν,σ), I - integral d-d izmene, B - integral izmene s-d elektrona i N - broj čvorova u rešetki.

Sada da vidimo fizički smisao operatora H_{sd}.

Ako uvedemo oznake:

$$a_{g\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\nu} a_{\nu\sigma}\, e^{i(\nu,g)} \qquad I(f) = \frac{1}{N}\sum_{\nu} B(\nu)\, e^{i(f,\nu)}$$

posmatrani operator dobija izgled

$$\hat{H}_{sd} = -\frac{1}{2}\sum_{fg} I(f-g)\Big\{ S^z_f \big(a^{+}_{g,-\frac{1}{2}} a_{g,-\frac{1}{2}} - a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,\frac{1}{2}}\big) + S^x_f \big(a^{+}_{g,-\frac{1}{2}} a_{g,\frac{1}{2}} + \qquad (1.30)$$

$$+ a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,-\frac{1}{2}}\big) + i S^y_f \big(a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,-\frac{1}{2}} - a^{+}_{g,-\frac{1}{2}} a_{g,\frac{1}{2}}\big)\Big\}$$

Definišimo nove operatore i to na prostornim funkcijama okupacionog broja koji pokazuje koliko se čestica nalazi u odredjenom stanju (tačnije, na odredjenom energetskom nivou)

$$\sigma^x_g = \frac{1}{2}\big(a^{+}_{g,-\frac{1}{2}} a_{g,\frac{1}{2}} + a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,-\frac{1}{2}}\big) \; ; \quad \sigma^y_g = \frac{i}{2}\big(a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,-\frac{1}{2}} - a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,\frac{1}{2}}\big) \; ;$$

$$\sigma^z_g = \frac{1}{2}\big(a^{+}_{g,-\frac{1}{2}} a_{g,-\frac{1}{2}} - a^{+}_{g,\frac{1}{2}} a_{g,\frac{1}{2}}\big)$$

i dopustimo da oni zadovoljavaju uslov:

$$n_{f,-\frac{1}{2}} + n_{f,\frac{1}{2}} = 1 \; ; \quad n_{f\sigma} = a^{+}_{f\sigma} a_{f\sigma} \qquad \sigma = \pm\frac{1}{2} \qquad (1.31)$$

Za s - elektrone uslovi (1.31) ne važe striktno, ali ako tu okolnost zanemarimo, onda operator s-d interakcije dobija oblik

$$\hat{H}_{sd} = - \sum_{f,g} I(f-g)(\sigma_f, \sigma_g) \tag{1.32}$$

Na ovaj način, koji je prihvaćen u teoriji s-d modela, izraz za interakciju s i d elektrona se zaista može interpretirati kao integral izmene.

II GLAVA

A N T I F E R O M A G N E T I C I

1. Kanoničke transformacije za spinske operatore

U slučaju kada se kristalna rešetka sastoji od više podrešetki osnovni problem predstavlja odredjivanje ose kvantizacije sistema, a pravac te ose proizilazi iz zahteva da sistem treba da ima minimalnu energiju osnovnog stanja.
Hamiltonijan magnetika sa složenom rešetkom može se napisati u sledećem obliku:

$$H=-\sum_{a}\mu\vec{\mathcal{H}}\vec{\sigma}_a-\frac{1}{2}\sum_{a,b}I_{ab}\vec{\sigma}_a\vec{\sigma}_b= \tag{2.1}$$

$$=-\sum_{a,\alpha}\mu\mathcal{H}^{\alpha}\sigma_a^{\alpha}-\frac{1}{2}\sum_{a,b,\alpha}I_{ab}\sigma_a^{\alpha}\sigma_b^{\alpha}$$

$a=\vec{n}\theta$, $b=\vec{m}\omega$, $\alpha=x,y,z$

Pošto je predmet naše analize antiferomagnetik, indeksi θ i ω uzimaju samo dve vrednosti: 1 i 2. Takodje ćemo uzeti da su intenziteti spinova u obe podrešetke isti.

Da bi smo Hamiltonijan (2.1) stabilizovali, tj. odabrali mu osu kvantizacije, izvršićemo unitarnu i kanoničku transformaciju spinskih operatora $\vec{\sigma}$ i preći na nove spinske operatore $\vec{S}$. Transformacije ćemo odabrati u sledećem obliku:

$$\sigma^{\alpha}=\gamma^{\alpha}S^{z}+A^{\alpha}S^{+}+A^{*\alpha}S^{-} \qquad \alpha=x,y,z \tag{2.2}$$

Da bi (2.2) bila unitarna transformacija mora biti ispunjen uslov

$$\sum_{\alpha}(\sigma^{\alpha})^2=\sum_{\alpha}(S^{\alpha})^2 \tag{2.3}$$

što znači da se pri transformaciji mora održavati intenzitet spina, a da bi bila kanonička moraju se, i posle zamene operatora σ sa S, održati komutacione relacije

$$[\sigma^x,\sigma^y]=i\sigma^z \;;\quad [\sigma^z,\sigma^x]=i\sigma^y \;;\quad [\sigma^y,\sigma^z]=i\sigma^x \tag{2.4}$$

Na osnovu (2.2), (2.3), (2.4) i pretpostavke da je $\vec{\gamma}$ realan vektor, dolazimo do zaključka da vektori $\vec{\gamma}$, $\vec{A}$ i $\vec{A}^*$ moraju zadovoljavati sledeće uslove:

$$\vec{\gamma}^2=1 \;;\quad \vec{A}^2=\vec{A}^{*2}=0 \;;\quad \vec{A}\vec{A}^*=\frac{1}{2} \;;\quad \vec{\gamma}\vec{A}=\vec{\gamma}\vec{A}^*=0$$

$$\vec{\gamma}\times\vec{A}=i\vec{A} \;;\quad \vec{A}^*\times\vec{\gamma}=i\vec{A}^* \;;\quad \vec{A}\times\vec{A}^*=\frac{1}{2}\vec{\gamma} \;;\quad |A^\alpha|^2=\frac{1}{4}\left[1-(\gamma^\alpha)^2\right] \qquad (2.5)$$

Jedan od mogućih izbora ovih vektora, u saglasnosti sa (2.5) je

$$A^x=e^{i\varphi}\frac{1-\gamma^z}{4}-e^{-i\varphi}\frac{1+\gamma^z}{4} \;;\quad A^z=\frac{1}{2}\sqrt{1-(\gamma^z)^2} \;;$$

$$A^y=i\left[e^{i\varphi}\frac{1-\gamma^z}{4}+e^{-i\varphi}\frac{1+\gamma^z}{4}\right] \;;\quad \operatorname{tg}\varphi=\frac{\gamma^y}{\gamma^x} \qquad (2.6)$$

Posle zamene (2.2) u (2.1) i izdvajanja energije osnovnog stanja, za Hamiltonijan magnetika dobijamo:

$$H_0=-N\Big\{\mu S\sum_{\alpha,\theta}\mathcal{H}^\alpha\gamma_\theta^\alpha+\frac{1}{2}S^2\sum_{\alpha,\theta,\omega}\gamma_\theta^\alpha\gamma_\omega^\alpha J_0(\theta,\omega)\Big\} \qquad (2.7)$$

$$J_0(\theta,\omega)=\sum_{\vec{l}} I_{\vec{l}}(\theta,\omega)$$

Kao što se vidi energija osnovnog stanja izražena je isključivo preko komponenata vektora $\vec{\gamma}$, što da izbor ose kvantizacije nameće uslove samo na taj vektor $\vec{\gamma}$. Minimum energije osnovnog stanja tražićemo metodima varijacionog računa, pri čemu treba voditi računa da za komponente $\vec{\gamma}$ važi ograničenje $\sum_\alpha(\gamma^\alpha)^2=1$. U tom slučaju primenjuje se metod neodredjenih Lagrangeovih množitelja, a to znači da ćemo relaciju (ograničenje) za γ pomnožiti sa $\frac{1}{2}S\lambda_\theta$, gde su λ_θ - neodredjeni Lagrangeovi množitelji, dobijeni izraz sumirati po $\vec{n}$ i $\vec{\theta}$ i dodati ga na energiju osnovnog stanja, posle čega se dobijena forma varira po γ_θ^α i varijacija izjednačuje sa nulom. Drugim rečima treba varirati veličinu:

$$\mu\sum_{\alpha,\theta}\mathcal{H}^\alpha\gamma_\theta^\alpha+\frac{1}{2}S\sum_{\alpha,\theta,\omega}\gamma_\theta^\alpha\gamma_\omega^\alpha J_0(\theta,\omega)+\frac{1}{2}\sum_\theta S\lambda_\theta-\frac{1}{2}\sum_{\alpha,\theta}S\lambda_\theta(\gamma_\theta^\alpha)^2$$

jer je zavisnost od $\vec{n}$ prilikom variranja nebitna.
Izjednačujući varijaciju poslednjeg izraza sa nulom dobijamo sistem jednačina za odredjivanje komponenata vektora $\vec{\gamma}$ i neod-

redjenih Lagrangeovih množitelja λ_θ

$$\lambda_\theta \gamma_\theta^\alpha - \sum_\omega J_0(\theta,\omega)\gamma_\omega^\alpha = \frac{\mu \mathcal{H}}{S} \qquad (2.8)$$

$$\theta,\omega = 1,2 \qquad \alpha = x,y,z$$

Znak i veličinu integrala izmene, kao i pravac spoljašnjeg magnetnog polja $\vec{\mathcal{H}}$ treba birati u svakom konkretnom slučaju tako da za funkcije γ_θ^α koje predstavljaju rešenja sistema (2.8), energija osnovnog stanja ima minimalnu vrednost (uslov (2.8) je de facto uslov samo njene ekstremalnosti).

2. Hamiltonijan antiferomagnetika

Antiferomagnetik se sastoji od dve podrešetke. Spinovi svake od podrešetki su jednaki i suprotno orijentisani. Ove činjenice treba uzeti u obzir prilikom rešavanja sistema (2.8). Drugim rečima, pošto su spinovi istog pravca, spoljašnje magnetno polje možemo usmeriti duž jedne od koordinatnih osa.
Uzme li se da je polje $\vec{\mathcal{H}}$ u pravcu ose z , može se pisati:

$$\mathcal{H}^\alpha = \mathcal{H}\delta_{\alpha,z} \qquad (2.9)$$

Za ovakav izbor pravca spoljašnjeg polja sistem jednačina (2.8) za $\theta = 1,2$ i $\alpha = x,y$ svodi se na

$$\begin{aligned} [\lambda_1 - J_0(1,1)]\gamma_1^\alpha - J_0(1,2)\gamma_2^\alpha &= 0 \\ -J_0(2,1)\gamma_1^\alpha + [\lambda_2 - J_0(2,2)]\gamma_2^\alpha &= 0 \end{aligned} \qquad (2.10)$$

Izjednačujući determinantu sa nulom dolazimo do rezultata:

$$\lambda_1 = J_0(1,1) - J_0(1,2) \qquad \lambda_2 = J_0(2,2) - J_0(2,1) \qquad (2.11)$$

a za ovakav izbor množitelja λ sledi

$$\gamma_1^\alpha + \gamma_2^\alpha = 0 \qquad \text{za} \quad \alpha = x,y \qquad (2.12)$$

Pošto je $J_0(1,2) = J_0(2,1)$ za $\alpha = z$ jednačine sistema (2.8) ($\theta = 1,2$) svode se na jednu jednačinu:

$$\gamma_1^z = \gamma_2^z = \frac{-\mu\mathcal{H}}{2SJ_0(1,2)} \qquad (2.13)$$

Zamenjujući dobijene vrednosti za γ_θ^{α} u izrazu za energiju osnovnog stanja lako se može zaključiti da će ona biti minimalna ako je $J_0(1,1)>0$, $J_0(2,2)>0$ a $J_0(1,2)=J_0(2,1)<0$. Ova, minimalna vrednost energije osnovnog stanja, data je izrazom:

$$H_0 = -NS\{h\mu\mathcal{H} + \frac{1}{2}S[J_0(1,1)+J_0(2,2)+2|J_0(1,2)|]\} \qquad (2.14)$$

gde je

$$h = \frac{\mu\mathcal{H}}{2S|J_0(1,2)|} \qquad (2.15)$$

Veličina

$$\mathcal{H}_c = \frac{2S|J_0(1,2)|}{\mu} \qquad (2.16)$$

naziva se kritično magnetno polje.
Pravac ose kvantizacije, na osnovu (2.13) i (2.16), izlazi

$$\gamma_1^z = \gamma_2^z = \frac{\mathcal{H}}{\mathcal{H}_c} = h \leq 1 \qquad (2.17)$$

Funkcija γ^z je, ustvari, kosinus ugla koji osa kvantizacije zaklapa sa osom z.
Na osnovu (2.17) dolazimo do zaključka da dokle je spoljašnje polje $\mathcal{H}$ manje od kritičnog polja $\mathcal{H}_c$ struktura ostaje antiferomagnet, kada se spinovi, koji su bez spoljašnjeg polja antiparalelni, usmeravaju duž spoljašnjeg polja $\mathcal{H}$. Kada je $\mathcal{H}=\mathcal{H}_c$ antiferomagnetna struktura se narušava, a za slučaj $\mathcal{H}>\mathcal{H}_c$ ona postaje feromagnetik, jer se spinovi usmeravaju paralelno i u smeru spoljašnjeg polja $\mathcal{H}$.
Na osnovu (2.12), (2.13), (2.17) i (2.6) mogu se naći komponente vektora $\vec{\gamma}$, $\vec{A}$ i $\vec{A}^*$ za slučaj antiferomagnetnog uredjenja strukture i one su date sa

$$\gamma_1^x = \sqrt{1-h^2}\ ;\ \gamma_1^y = 0\ ;\ \gamma_1^z = h\ ;\ A_1^x = -\frac{h}{2}\ ;\ A_1^y = \frac{i}{2}\ ;\ A_1^z = \frac{1}{2}\sqrt{1-h^2} \qquad (2.18)$$

Koristeći formule (2.2), (2.11) i (2.18) Hamiltonijan antiferomagnetika (2.1) možemo napisati

$$H = H_0 + \sum_{\vec{n},\theta} \Delta_\theta (S - S^z_{\vec{n}\theta}) - \sum_{\substack{\vec{n},\vec{m}\\ \theta,\omega}} X_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega) S^-_{\vec{n}\theta} S^+_{\vec{m}\omega} - \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n},\vec{m}\\ \theta,\omega}} Y_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega) \times$$
$$\times (S^-_{\vec{n}\theta} S^-_{\vec{m}\omega} + S^+_{\vec{m}\omega} S^+_{\vec{n}\theta}) - \sum_{\substack{\vec{n}\vec{m}\\ \theta,\omega}} Z_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega)[S^-_{\vec{n}\theta}(S - S^z_{\vec{m}\omega}) + (S - S^z_{\vec{m}\omega})S^+_{\vec{n}\theta}] - \quad (2.19)$$
$$- \frac{1}{2}\sum_{\substack{\vec{n},\vec{m}\\ \theta,\omega}} W_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega)(S - S^z_{\vec{n}\theta})(S - S^z_{\vec{m}\omega})$$

gde su

$$\Delta_1 = S[J_0(1,1) - J_0(1,2)] = S[J_0(1,1) + |J_0(1,2)|] ;$$
$$\Delta_2 = S[J_0(2,2) - J_0(2,1)] = S[J_0(2,2) + |J_0(2,1)|] ;$$
$$X_{\vec{n}\vec{m}}(1,1) = \frac{1}{2} I_{\vec{n}\vec{m}}(1,1) ; \quad X_{\vec{n}\vec{m}}(2,2) = \frac{1}{2} I_{\vec{n}\vec{m}}(2,2) ;$$
$$X_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) = -\frac{h^2}{2} I_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) ; \quad X_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) = -\frac{h^2}{2} I_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) ;$$
$$Y_{\vec{n}\vec{m}}(1,1) = 0 ; \quad Y_{\vec{n}\vec{m}}(2,2) = 0 \qquad (2.20)$$
$$Y_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) = \frac{1}{2}(1-h^2) I_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) ; \quad Y_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) = \frac{1}{2}(1-h^2) I_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) ;$$
$$Z_{\vec{n}\vec{m}}(1,1) = 0 ; \quad Z_{\vec{n}\vec{m}}(2,2) = 0 ;$$
$$Z_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) = h\sqrt{1-h^2}\, I_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) ; \quad Z_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) = h\sqrt{1-h^2}\, I_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) ;$$
$$W_{\vec{n}\vec{m}}(1,1) = I_{\vec{n}\vec{m}}(1,1) ; \quad W_{\vec{n}\vec{m}}(2,2) = I_{\vec{n}\vec{m}}(2,2) ;$$
$$W_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) = -(1-2h^2) I_{\vec{n}\vec{m}}(1,2) ; \quad W_{\vec{n}\vec{m}}(2,1) = -(1-2h^2) I_{\vec{n}\vec{m}}(2,1)$$

Kao što vidimo iz izraza (2.19) zbog prisustva člana proporcionalnog $Y_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega)$ u sistemu koji analiziramo ukupan broj spinskih talasa se ne održava, što znači da energija osnovnog stanja antiferomagnetika (2.14) još uvek nije dobro definisana. Naš dalji cilj je da izvršimo korekcije veličine H_0 koje nastaju usled neodržanja kvazičestica u antiferomagnetiku.

3. Unitarna transformacija Hamiltonijana

U predhodnom paragrafu napomenuli smo da Hamiltonijan (2.19) ima takvu operatorsku strukturu da se u sistemu koji on opisuje broj kvazičestica ne održava. Takođe je rečeno da je jedna od posledica neodržanja pojava korekcionih članova u izrazu za energiju osnovnog stanja.

Sa ciljem da nađemo korekcije energije osnovnog stanja antiferomagnetika, izvršićemo unitarnu transformaciju Hamiltonijana (2.19). Ova transformacija treba da je takva, da se pomoću nje iz dobijenog ekvivalentnog Hamiltonijana u maksimalno mogućoj meri eliminišu članovi proporcionalni S^+S^+ zbog kojih i nastaje neodržanje totalnog broja kvazičestica. Pomenutu unitarnu transformaciju izvršićemo koristeći Vajlov identitet, na osnovu koga ekvivalentni Hamiltonijan ima oblik:

$$H_{eq} = e^{-\hat{F}} H e^{\hat{F}} = H + \sum_{n=0}^{\infty} \frac{(-1)^n}{n!} [\hat{F},[\hat{F},[\hat{F}, \cdots [\hat{F},H]] \cdots] \approx$$
$$\approx H - [\hat{F},H] + \frac{1}{2}[\hat{F},[\hat{F},H]] \cdots \qquad (2.21)$$

Da bi transformacija (2.21) bila unitarna, operator $\hat{F}$ mora biti antiermitski, pa ćemo ga zato napisati u obliku

$$\hat{F} = \hat{F}_1 - \hat{F}_1^+ \quad ; \quad [\hat{F},H] = [\hat{F}_1,H] + [\hat{F}_1,H]^+ \qquad (2.22)$$

Operator $\hat{F}_1$ uzećemo u sledećem obliku

$$\hat{F}_1 = \sum_{\vec{n}\theta} \alpha_\theta S^+_{\vec{n}\theta} + \sum_{\substack{\vec{n},\vec{m}\\ \theta,\omega}} \beta_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega) S^+_{\vec{n}\theta} S^+_{\vec{m}\omega} \qquad (2.23)$$

$$\beta_{\vec{n}\vec{m}}(\theta,\omega) = \beta_{\vec{m}\vec{n}}(\omega,\theta) \qquad \beta_{\vec{n}\vec{n}}(\theta,\theta) = 0$$

Funkcije α, β u formuli (2.23) su realne, jer Hamiltonijan H sadrži realne matrične elemente. Drugi član u $\hat{F}_1$ služi za eliminaciju članova koji izazivaju neodržanje, tj. onih koji su proporcionalni S^+S^+. Prisustvo prvog člana je neophodno zbog toga što se zbog komutiranja drugog člana sa H u ekvivalentnom

Hamiltonijanu pojavljuju delovi proporcionalni $\overset{+}{S}$ i ove delove ćemo eliminisati pogodnim izborom funkcije α.

Zamenom (2.23) u (2.21) dobijamo ekvivalentni Hamiltonijan (u aproksimaciji koja je naznačena u formuli (2.21)), i ako iz njega eliminišemo delove koji su proporcionalni S^+ i $\overset{+}{S}\overset{+}{S}$, za funkcije α i β dobijamo sledeći sistem jednačina:

$$\Delta_\mu \alpha_\mu - 2S\sum_{\vec{b},\nu}\left[X_{\vec{a}-\vec{b}}(\mu,\nu)+Y_{\vec{a}-\vec{b}}(\mu,\nu)\right]\alpha_\nu - 4S\sum_{\vec{b},\nu} Z_{\vec{a}-\vec{b}}(\mu,\nu)\beta_{\vec{a}-\vec{b}}(\mu,\nu) = 0$$

$$-Z_{\vec{a}-\vec{m}}(\mu,\nu)\alpha_\mu + \left[2\Delta_\mu - W_{\vec{a}-\vec{m}}(\mu,\omega)\right]\beta_{\vec{a}-\vec{m}}(\mu,\omega) - 4S\sum_{\vec{b},\nu} X_{\vec{b}-\vec{m}}(\nu,\omega)\beta_{\vec{a}-\vec{b}}(\mu,\nu) = \tag{2.24}$$

$$= -\frac{1}{2}Y_{\vec{a}-\vec{m}}(\mu,\omega) \qquad\qquad \mu,\nu,\omega = 1,2$$

Pošto izvršimo Furije transformacije, veličine koje ulaze u jednačinu (2.24)

$$X_{\mu\nu}(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} X_{\vec{l}}(\mu,\nu)e^{-i\vec{k}\vec{l}} \; ; \quad X_{\mu\nu}(0) = \sum_{\vec{l}} X_{\vec{l}}(\mu,\nu) \; ; \quad Y_{\mu\nu}(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} Y_{\vec{l}}(\mu,\nu) \; ,$$

$$Y_{\mu\nu}(0) = \sum_{\vec{l}} Y_{\vec{l}}(\mu,\nu) \; ; \quad Z_{\mu\nu}(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} Z_{\vec{l}}(\mu,\nu)e^{-i\vec{k}\vec{l}} \; , \tag{2.25}$$

$$W_{\mu\nu}(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} W_{\vec{l}}(\mu,\nu)e^{-i\vec{k}\vec{l}} \; ; \quad \beta_{\mu\nu}(\vec{k}) = \sum_{\vec{l}} \beta_{\vec{l}}(\mu,\nu)e^{-i\vec{k}\vec{l}}$$

i sistem (2.24)se svodi na:

$$\Delta_\mu \alpha_\mu - 2S\sum_{\nu}\left[X_0(\mu,\nu)+Y_0(\mu,\nu)\right]\alpha_\nu - 4SN^{-1}\sum_{\vec{q},\nu} Z_{\vec{q}}(\mu,\nu)\beta_{\vec{q}}(\mu,\nu) = 0$$

$$-Z_{\vec{k}}(\mu,\omega)\alpha_\mu + 2\Delta_\mu\beta_{\vec{k}}(\mu,\omega) - 4S\sum_{\nu} X_{\vec{k}}(\nu,\omega)\beta_{\vec{k}}(\mu,\nu) - N^{-1}\sum_{\vec{q}} W_{\vec{k}-\vec{q}}(\mu,\omega)\beta_{\vec{q}}(\mu,\omega) = \tag{2.26}$$

$$= -\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(\mu,\omega)$$

Uzimajući $\mu=1,2$ i $\omega=1,2$ sistem (2.26),u razvijenom obliku, možemo napisati kao:

$$-Z_{\vec{k}}(1,\omega)\alpha_1 + 2\Delta_1\beta_{\vec{k}}(1,\omega) - 4S\sum_{\nu} X_{\vec{k}}(\nu,\omega)\beta_{\vec{k}}(1,\nu) - N^{-1}\sum_{\vec{q}} W_{\vec{k}-\vec{q}}(1,\omega)\beta_{\vec{q}}(1,\omega) = -\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(1,\omega) \; ;$$

$$-Z_{\vec{k}}(2,\omega)\alpha_2 + 2\Delta_2\beta_{\vec{k}}(2,\omega) - 4S\sum_{\nu} X_{\vec{k}}(\nu,\omega)\beta_{\vec{k}}(2,\nu) - N^{-1}\sum_{\vec{q}} W_{\vec{k}-\vec{q}}(2,\omega)\beta_{\vec{q}}(2,\omega) = -\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(2,\omega) \; , \tag{2.27}$$

$$\left[2\Delta_1 - 4SX_{\vec{k}}(1,1)\right]\beta_{\vec{k}}(1,1) - 4SX_{\vec{k}}(2,1)\beta_{\vec{k}}(1,2) = -\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(1,1) + N^{-1}\sum_{\vec{q}} W_{\vec{k}-\vec{q}}(1,1)\beta_{\vec{q}}(1,1) + Z_{\vec{k}}(1,1)\alpha_1 \; ;$$

$$-4SX_{\vec{k}}(1,2)\beta_{\vec{k}}(1,1)+[2\Delta_1-4SX_{\vec{k}}(2,2)]\beta_{\vec{k}}(1,2)=-\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(1,2)+N^{-1}\sum_{\vec{q}}W_{\vec{k}-\vec{q}}(1,2)\beta_{\vec{q}}(1,2)+Z_{\vec{k}}(1,2)\alpha_1 \; ,$$

$$[2\Delta_2-4SX_{\vec{k}}(1,1)]\beta_{\vec{k}}(2,1)-4SX_{\vec{k}}(2,1)\beta_{\vec{k}}(2,2)=-\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(2,1)+N^{-1}\sum_{\vec{q}}W_{\vec{k}-\vec{q}}(2,1)\beta_{\vec{q}}(2,1)+Z_{\vec{k}}(2,1)\alpha_2 \; , \qquad (2.27)$$

$$-4SX_{\vec{k}}(1,2)\beta_{\vec{k}}(2,1)+[2\Delta_2-4SX_{\vec{k}}(2,2)]\beta_{\vec{k}}(2,2)=-\frac{1}{2}Y_{\vec{k}}(2,2)+N^{-1}\sum_{\vec{q}}W_{\vec{k}-\vec{q}}(2,2)\beta_{\vec{q}}(2,2)+Z_{\vec{k}}(2,2)\alpha_2$$

Dobijeni sistem integralnih jednačina rešavamo metodom sukcesivnih aproksimacija, tako da su njegova približna rešenja data sa:

$$\alpha_1=\alpha_2=\frac{h\sqrt{1-h^2}}{4S}\,T_2 \; ,$$

$$\beta_{\vec{k}}(1,1)=\beta_{\vec{k}}(2,2)=\frac{h^2(1-h^2)}{8S}\,T_{\vec{k}}^2 \; , \qquad (2.28)$$

$$\beta_{\vec{k}}(1,2)=\beta_{\vec{k}}(2,1)=\frac{1-h^2}{8S}\,T_{\vec{k}} \; ,$$

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

Ove vrednosti za funkcije α i β uvrste se u ekvivalentni Hamiltonijan, posle čega on više ne sadrži članove proporcionalne SS^+, ali su mu za račun toga izmenjeni i H_0 i svi koeficijenti koji se pojavljuju u formuli (2.19). Nas će u daljem interesovati korekcija u veličini H_0. Pre no što pređemo na izračunavanje te korekcije, analiziraćemo tačnost sa kojom je eliminacija efekata neodrživa, jer ovi efekti nisu potpuno eliminisani, već samo približno, u skladu sa onim što je naznačeno u formuli (2.21). Iz forme funkcije α i β, veličina

$$\varepsilon=\frac{\sqrt{1-h^2}}{4S} \qquad (2.29)$$

je mali parametar Vajlovog razvoja, što znači da je aproksimacija (2.21) sve bolja ukoliko je spin S veći i ukoliko je h bliže jedinici, tj. ukoliko je antiferomagnet više blizak feromagnetu. Ovo poslednje je potpuno razumljivo, jer u čistom feromagnetu efekata neodržanja nema.

4. Korigovana energija osnovnog stanja

Ako iz ekvivalentnog Hamiltonijana (2.21) izdvojimo korekciju koja se pojavila posle eliminacije članova proporcionalnih $\overset{+}{S}\overset{+}{S}$ i $\overset{+}{S}$, onda dolazimo do sledećeg izraza za ovu korekciju:

$$\delta H_0 = -N|J_0(1,2)|\left\{S(1-h^2)^2T_2 + \frac{1}{2}Sh^4(1-h^2)^2T_2 - \right.$$
$$\left. -\frac{1}{4}S(1-h^2)^2(h^4Q_2+Q_1) - h^2(1-h^2)^2T_2\right\} + O\left(\frac{1}{4S}\right) \tag{2.30}$$

Funkcije Q_1 i Q_2 date su sa

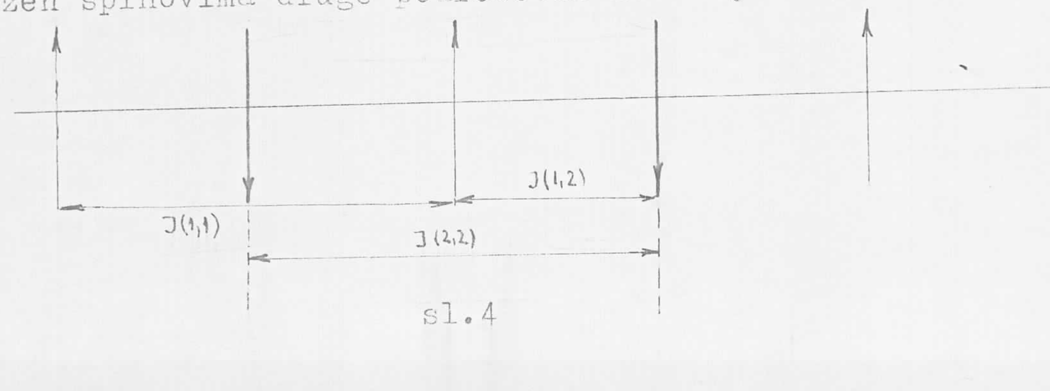
$$Q_1 = N^{-1}\sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}} \frac{J_{\vec{k}}(1,1) - J_0(1,1) + J_{\vec{k}}(2,2) - J_0(2,2) + 2J_0(1,2)}{J_0(1,2)}$$
$$Q_2 = N^{-1}\sum_{\vec{k}} T_{\vec{k}}^2 \frac{J_{\vec{k}}(1,1) - J_0(1,1) + J_{\vec{k}}(2,2) - J_0(2,2) + 2J_0(1,2)}{J_0(1,2)} \tag{2.31}$$

Prema tome, korigovana energija osnovnog stanja ima oblik

$$H_{eq}^{(0)} = H_0 + \delta H_0 + O\left(\frac{1}{4S}\right) \tag{2.32}$$

gde je H_0 dato formulom (2.14), a δH_0 formulom (2.30).

Da bismo izvršili procenu novo dobijene energije osnovnog stanja u izrazima za H_0 i δH_0 zanemarićemo sve članove koji nisu proporcionalni spinu S (pošto nam je mali parametar razvoja proporcionalan $\frac{1}{S}$, to se svi članovi koji se množe sa S veliki u odnosu na ostale), a takođe ćemo zanemariti integrale izmene $J_0(1,1)$ i $J_0(2,2)$ u odnosu na $|J_0(1,2)|$. Ova poslednja aproksimacija je u suštini ekvivalentna aproksimacija najbližih suseda, jer se, prema eksperimentalnim podacima, antiferomagnetici formiraju tako što je spin jedne podrešetke okružen spinovima druge podrešetke kao najbliži susedi (sl.4)



sl.4

Kada se izvrše ukazane aproksimacije onda je:

$$H_0 = -NS^2 |J_0(1,2)|(1+2h^2) \tag{2.33}$$

i

$$\delta H_0 = -NS|J_0(1,2)|T_2(1-h^2)^2 + O\left[\left(\frac{1}{4S}\right)^0\right] \tag{2.34}$$

Na osnovu ovih izraza izvršićemo brojnu analizu veličina $|H_0|$ i $|\delta H_0|$ kao i njihov procentualni odnos za različite spinove i različite vrednosti veličine h. Rezultati numeričkog računa dati su u tabeli 1.

h	S	H_0 [J]	δH_0 [J]	$\frac{\delta H_0}{H_0}$ [%]
0,2	1	39.029,0	5.782,1	17,3
	2	156.116,2	11.564,2	8,6
	3	351.261,4	17.346,2	5,8
	4	624.464,6	23.128,3	4,3
	5	975.726,0	28.910,4	3,5
0,8	1	82.394,6	2.168,3	2,6
	2	329.578,6	4.336,6	1,3
	3	741.551,8	6.504,8	0,9
	4	1 318.314,2	8.673,1	0,7
	5	2 059.866,0	10.841,4	0,5

tabela 1

Prilikom izračunavanja ovih vrednosti uzeto je da $J_0(1,2)$ za najbliže susede u prostoj kubnoj strukturi iznosi 6×10^{-13} erga. Osim toga na osnovu formule $T_2=N^{-1}\sum_{\vec{k}}\left[\frac{J_{\vec{k}}(1,2)}{J_0(1,2)}\right]^2$, lako je pokazati da je T_2 jednako recipročnom broju najbližih suseda. Pošto smo analizirali prostu kubnu strukturu, znači da je $T_2=\frac{1}{6}$.

Z A K LJ U Č A K

Rezultati istraživanja koja su izvršena u radu, pokazali su da eliminacija efekata neodržanja spinskih talasa u anti-feromagnetiku dovodi do ekvivalentnog Hamiltonijana, čija je energija osnovnog stanja niža od one koju daje metod klasične minimizacije. Zbog veoma komplikovanih računskih procedura eliminacija efekata neodržanja mogla je da se izvrši samo aproksimativno, i to po malom parametru Vajlovog razvoja $\varepsilon=\frac{\sqrt{1-h^2}}{4s}$. Dobijeni rezultati su utoliko korektniji ukoliko je spin veći i ukoliko je antiferomagnet bliži prelazu u feromagnetnu strukturu (h→1). Ono što se predpostavilo u uvodu, a to je da korektniji tretman pri proračunu energije osnovnog stanja treba da dovede do niže energije, ispostavilo se kao tačno, tj. energija osnovnog stanja posle kvantne rotacije sistema je manja od te iste energije dobijene klasičnom metodom, pri čemu to smanjenje može da ide i do 30% od klasične vrednosti za energiju osnovnog stanja.

U radu je analizirana sama korekcija energije osnovnog stanja, ali se rezultati koji su dobijeni mogu iskoristiti za izračunavanje korigovanog harmonijskog spektra spinskih talasa u antiferomagneticima kao i za izračunavanje osobina antiferomagnetika u oblasti Nelove temperature prelaza. Nije isključeno da bi ovo proširenje dovelo do rezultata koji bi mogli biti od dosad poznatih u literaturi i koji važe samo za Hamiltonijan dobijen klasičnom metodom rotacije sistema.

L I T E R A T U R A

1. S.V.Tjablikov: Metode kvantne teorije magnetizma, Nauka - Moskva (1965.) - /na ruskom/
2. A.I.Ahijezer, V.G.Barjahtar, S.V.Peletminskij: Spinski talasi, 173, 368, Moskva (1967.) - /na ruskom/
3. H.Frolich: Proc. Roy. Soc., 160A, 230 (1937.) - /na engl./
4. A.S.Davidov: Kvantna mehanika, Fizmatgiz - Moskva (1963.) - /na ruskom/
5. S.V.Vonsovskoj: Savremeno učenje o magnetizmu, Moskva (1953.) /na ruskom/
6. Charles Kittel: Uvod u fiziku čvrstog stanja, Beograd (1972.)
7. L.D.Landau, E.M.Lifšic: Kvantna mehanika, Moskva (1963.) - /na ruskom/.