



Univerzitet u Novom Sadu
Prirodno-matematički fakultet
Departman za fiziku



Primena Hajzenbergovog $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ modela na pniktide

Mentor:

Dr. Milan Pantić

Kandidat:

Dorđe Dangić

Oktobar, 2015.

Sadržaj

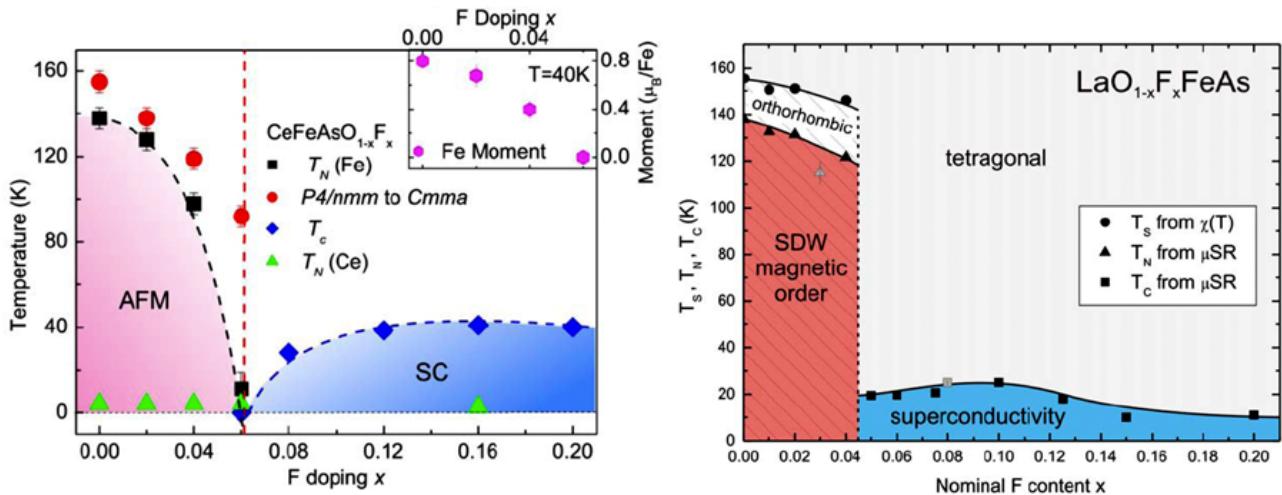
Uvod	1
1 Pniktidi i teorijski modeli	4
1.1 Kristalna struktura pniktida	4
1.2 Hajzenbergov model	5
2 Dvodimenzioni Hajzenbergov model sa $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ interakcijom	11
2.1 Bozonizacija i LSW pristup	11
2.1.1 Numerički rezultati	15
2.2 Spinski formalizam i RPA aproksimacija	19
2.2.1 Numerički rezultati	22
3 Trodimenzioni anizotropni Hajzenbergov $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ model	24
3.1 Trodimenzioni hamiltonijan sa spinskou anizotropijom	25
3.1.1 Bozonizacija 3D hamiltonijana	25
3.1.2 Trodimenzioni hamiltonijan u spinskou formalizmu	29
3.2 Trodimenzioni hamiltonijan sa jednojonskom anizotropijom	34
3.2.1 Anderson-Kalen dekuplovanje	35
3.2.2 Devlinov metod dekuplovanja	43
4 Zaključak	55
Dodatak A Metod dvovremenskih temperaturnih Grinovih funkcija	58
Dodatak B Magnetno-kristalografska (jednojonska) anizotropija	65

Uvod

Prvi navodi o postojanju superprovodne faze u jedinjenju $LaOFeAs$ pojavili su se 2006. godine sa poprilično niskom kritičnom temperaturom, od oko 3 K [1]. Kasnije, tačnije 2008., otkrivena je superprovodnost na temperaturi $T_c = 26$ K u ovom jedinjenju dopiranom fluorom, $LaO_{1-x}F_xFeAs$. Ovo je pokrenulo veliki broj istraživanja na ovom tipu materijala i ubrzalo su otkrivena jedinjenja sa višim kritičnim temperaturama ($CeO_{1-x}F_xFeAs$ sa $T_c = 41$ K; $PrO_{1-x}F_xFeAs$ sa $T_c = 52$ K i konačno $SmO_{1-x}F_xFeAs$ sa $T_c = 55$ K).

Svi navedeni materijali i jedinjenja pripadaju grupi takozvanih željeznih pniktida, ili oksipniktida u slučaju prisustva kiseonika. U opštem slučaju ova se jedinjenja mogu predstaviti u obliku $ReOFeAs$, gde Re predstavlja atom elementa iz grupe retkih zemalja kao što su lantan, La , ili gadolinijum, Ga . Ubrzo nakon otkrića superprovodnosti kod oksipniktida, ona je pronađena i kod običnih pniktida (jedinjenje $BaFe_2As_2$). Superprovodnost su pokazala i jedinjenja kod kojih je alkalni metal barijum zamjenjen kalcijumom ili stroncijumom.

Ova jedinjenja, kada su nedopirana, su antiferomagneti. Prve naznake o postojanju magnetnog uređenja u ovom tipu materijala dala su merenja električne provodljivosti i magnetne susceptibilnosti koja su pokazivala anomalije u blizini $T = 150$ K [2]. Na ovim temperaturama dolazi do strukturalne promene iz tetragonalne u ortorombičnu fazu. Prepostavljaljalo se da sa ovom promenom mora doći i do promena magnetne faze. Do promene magnetne faze zaista i dolazi, ali na nešto nižim temperaturama, oko $T = 137$ K. Rezultujuće magnetno uređenje je antiferomagnetna promena feromagnetskih lanaca, odnosno takozvana “stripe” ili kolinearna faza. Ovo je dosta drugačije od bakarnih superprovodnih materijala koji imaju običnu antiferomagnetnu strukturu u nedopiranoj fazi. Za razliku od njih, takođe, željezni pniktidi su loši metali, dok su kuprati Motovi izolatori.



Slika 1: Fazni dijagram dva željezna pniktida

Ipak postoji neka analogija između ove dve vrste visokotemperaturnih superprovodnika. I kod jednih i kod drugih do superprovodne faze se dolazi dopiranjem osnovnih jedinjenja. Dopriranje i kod jednih i drugih uništava magnetno uređenje. Tako u oba slučaja superprovodna faza se nalazi u blizini antiferomagnetne faze i zbog toga se sumnja da se superprovodnost uspostavlja usled interakcije elektrona sa magnetnim fluktuacijama.

Fazni dijagram prelaska iz antiferomagnetne u superprovodnu fazu je dat na slici 1. Na slici levo vidimo fazni dijagram za jedinjenje $CeO_{1-x}F_xFeAs$ u odnosu na temperaturu i udio fluora u jedinjenju. Primećuje se gladak prelaz iz antiferomagnetne u superprovodnu fazu, što ukazuje na fazni prelaz drugog reda. T_N predstavlja Neelovu temperaturu, T_c kritičnu temperaturu za superprovodno stanje, a crveni kružić temperaturu strukturalne promene. Na desnoj slici imamo fazni dijagram za jedinjenje $LaO_{1-x}F_xFeAs$ sa istim parametrima. Za razliku od prethodnog slučaja vidimo nagli prelaz iz antiferomagnetne u superprovodnu fazu, što odgovara faznom prelazu prvog reda. T_N i T_c imaju ista značenja, dok T_s predstavlja temperaturu strukturne promjene. U oba slučaja vidimo da superprovodnost pokazuje maksimalnu temperaturu za određene koncentracije dopiranog elementa.

Sva jedinjenja iz grupe željeznih pniktida se sastoje od negativno nanelektrisanih ravnih $FeAs$, koje se smjenjuju sa pozitivno nanelektrisanim ravnima koje sadrže ostale elemente. Iako ovo predstavlja dosta veliku sličnost sa već pomenutim kupratima, postojanje jake nezavisnosti dvodimenzionalih struktura u okviru jedinjenja, za razliku od kuprata, kod pniktida nije zane-

marljiva interakcija između slojeva, odnosno ravni. Zbog toga za pniktide je mnogo bolji izbor trodimenzioni model.

U ovom radu ćemo se posvetiti proučavanju Hajzenbergovog $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ modela u dve, odnosno tri, dimenzije u prisustvu anizotropije. Cilj nam je ispitati kakav i koliki uticaj ima postojanje parametra anizotropije na neke fizičke veličine, poput magnetizacije, kritične temperature itd. Hamiltonian će biti analiziran pomoću dvije metode. Prvi metod koji ćemo koristiti je “bozonizacija” Hamiltonijana preko Holštajn-Primakovljeve transformacije pri čemu se zadržavamo samo na kvadratnim članovima (“linear spin wave theory”, LSW teorija). Kao drugi metod koristimo spinski formalizam u okviru aproksimacije slučajnih faza (“random phase approximation”, RPA). Pri analizi oba modela koristićemo Grinove funkcije kako bismo dobili izraze za magnetizaciju, kritičnu temperaturu, brzine spinskih talasa... Uradićemo numeričku analizu dobijenih rezultata i uporediti ih sa dostupnim eksperimentalno dobijenim vrednostima.

Glava 1

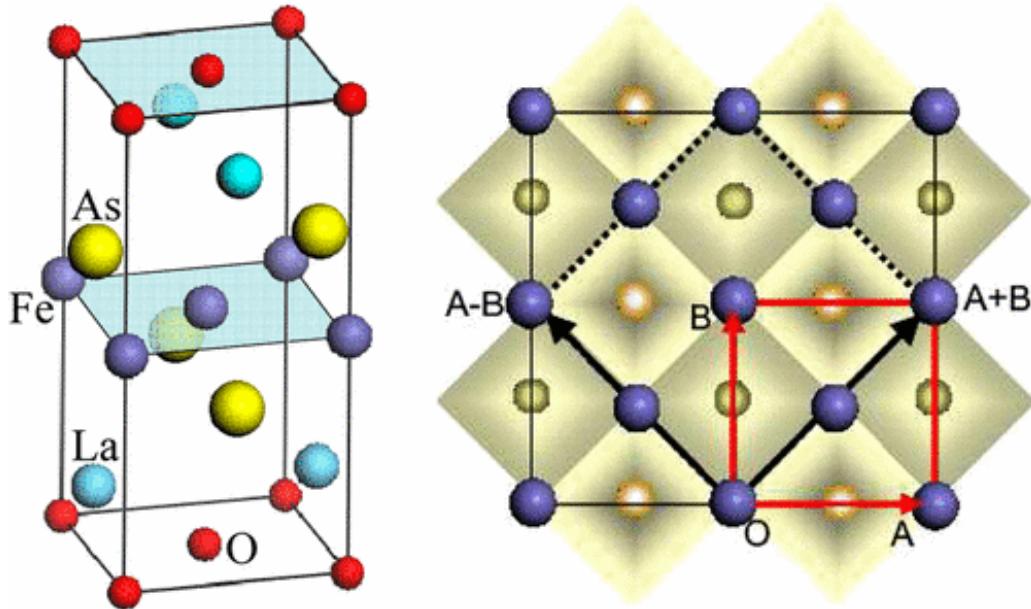
Pniktidi i teorijski modeli

1.1 Kristalna struktura pniktida

Pniktidi su jedinjenja koja sadrže atome iz azotne grupe elemenata u koju spadaju azot, fosfor, arsen, antimon i bizmut. Ime su dobili od grčke reči *pnigein* što znači gušiti, što je inače osobina molekularnog azota. U daljem tekstu kada kažemo pniktidi najčešće mislimo na arsenide železa koji poseduju superprovodne osobine na relativno visokim temperaturama.

Posmatrajući pniktide, najviša kritična temperatura, pri prelasku u superprovodno stanje, je nađena kod železnih oksipniktida, jedinjenja oblika $ReOFeAs$, gde Re stoji za retke zemlje. Sva ova jedinjenja na sobnoj temperaturi imaju tetragonalnu strukturu sa $P4/nmm$ prostornom grupom. Njihova kristalna struktura se sastoji od $FeAs$ slojeva usendvičenih između LaO slojeva. $FeAs$ sloj je ustvari sastavljen od tri bliske ravni: jedne, kvadratne, koja se sastoji od atoma železa i koja se nalazi između dve ravni sastavljene od As atoma. To znači da je svaki atom železa okružen tetraedrom arsenovih atoma. Ukratko, sloj $FeAs$ je sastavljen od $FeAs_4$ kompleksa. Udaljenost između slojeva $FeAs$ i LaO iznosi 1.8 Å. Na slici 1.1 je prikazana struktura jedinjena $LaOFeAs$, kao i dvodimenzioni prikaz $FeAs$ sloja. Tamne i svetle tačke na slici b predstavljaju arsenove atome ispod i iznad ravni u kojoj se nalaze atomi železa.

U tabeli 1.1 su dati parametri rešetke za neka jedinjenja iz grupe $ReOFeAs$. Kao što vidimo iz tabele, tetragonalna ćelija ovih jedinjenja je jako izdužena što je uzrok pojave anizotropije u svim fizičkim veličinama ovih jedinjenja. Takođe, to objašnjava i kvazi-dvodimenzionu prirodu

Slika 1.1: Kristalna struktura $LaOFeAs$ [16]

$ReOFeAs$	La	Ce	Nd	Pr	Gd	Sm
$T_c [K]$	41	41	51.9	52	53.5	55
$a \cdot \text{\AA}$	4.035	3.996	3.940	3.925		3.940
$c \cdot \text{\AA}$	8.740	8.648	8.496	8.595		8.496

Tabela 1.1: Vrednosti kritičnih temperatura i parametara rešetke za neka jedinjenja železnih oksipniktida

elektronskih stanja. Prvi susedi atomima železa su atomi arsena tako da se sva izmenska interakcija između dva atoma železa odvija posredstvom atoma arsena.

1.2 Hajzenbergov model

Za istraživanje kinetičkih svojstava i interakcije među elektronima, kao veoma dobar a jednostavan, pokazao se Habardov model. On je oblika:

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

Ovde su $c_{i,s}^\dagger c_{j,s}$ kreacioni i anihilacioni operatori elektrona sa spinom $s = \uparrow, \downarrow$, t je integral prelaza elektrona sa čvora na čvor, dok je $U > 0$ Kulonovo odbijanje elektrona na istom čvoru, a μ je hemijski potencijal. Habardov model se može perturbativno tretirati u dva granična slučaja:

- granica slabe kulonovske interakcije $U \ll t$. U ovom slučaju se koristi standardna teorija perturbacija kako bi se došlo do rezultata i
- granica jake kulonovske interakcije, atomska granica, $U \gg t$. Ovde se koristi pogodna transformacija kako bi se dobio poznati $t - J$ model.

Teškoće sa ovim modelom se javljaju pri vrednostima kulonovske interakcije $U \sim t$, odnosno gde se ne javlja mali parametar i gde nije moguće primeniti teoriju perturbacije. U toj oblasti parametara rezultati se dobijaju ekstrapolacijom dva ranije navedena granična slučaja.

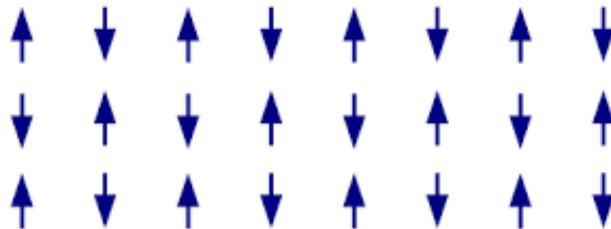
Ponovo se vratimo na analogiju sa superprovodnim kupratima. Kod njih se izučava model jake kulonovske interakcije. Eksperimenti sa železnim pniktidima su pokazali da je kod ove grupe jedinjenja uticaj kulonovskog odbijanja manji nego kod kuprata. Jačina kulonovskog odbijanja kod ovih materijala je procenjena iz raznih eksperimenata na $U = 2$ eV, što je uporedivo sa širinom zone ($W = 4$ eV)[3]. Drugi proračuni su davali nešto veće očekivane vrednosti za Kulonovsko odbijanje, ali i dalje uporedive sa širinom zone. Takođe, pokazano je da je za pniktide sa osnovom arsena kulonovo odbijanje mnogo važnije, nego kod onih sa fosforom kao osnovom.

Ovim rezonovanjem možemo zaključiti da se navedena jedinjenja opisuju drugim slučajem Habardovog modela. Za $U \rightarrow \infty$, teorijom perturbacije, od Habardovog modela možemo dobiti Hajzenbergov model:

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

gde su $\vec{S}_{i,j}$ vektorski spinski operatori, a $J = 4t^2/U$ parametar izmenske interakcije. Za gvožđe Fe spin može imati vrednost $S = \{0, 1, 2\}$ i zbog Hundovih pravila očekivali bismo vrednosti spina $S = 2$. Ipak ova vrednost spina bi davana mnogo veće vrednosti magnetnog momenta nego što pokazuje eksperiment. Kako ni $S = 0$ nije u saglasnosti sa eksperimentom, jer daje mnogo manje vrijednosti magnetnog momenta, uzimamo da je spin jednak 1.

U slučaju da je J iz Hajzenbegovog modela veće od nule $J > 0$ imamo antiferomagnetski model i na temperaturi $T = 0$ K imamo tzv. Nelovo stanje, slika 1.2.



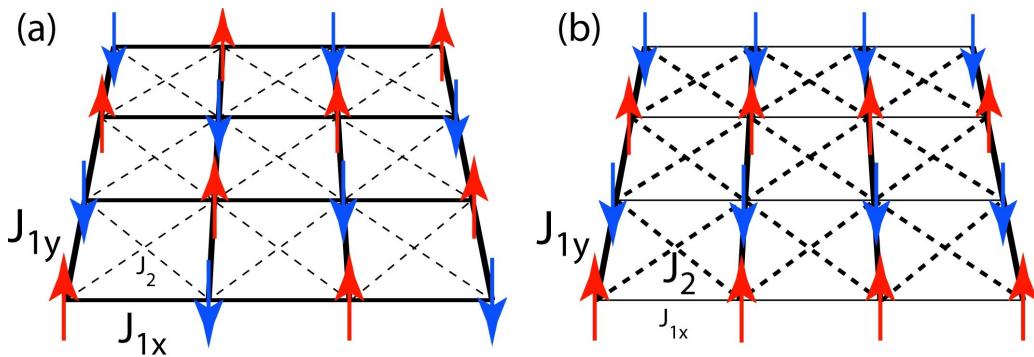
Slika 1.2: Nelovo stanje

Svi susedni spinovi su antiparalelno usmereni. Tako možemo čitavu rešetku podeliti u dve podrešetke u kojima su svi spinovi okrenuti u istom smeru. Interakcija postoji samo između najbližih suseda, tj. samo između spinova u različitim podrešetkama.

Drugi slučaj je, naravno, da je $J < 0$ i to je feromagnetni model. Na absolutnoj nuli imamo feromagnetno uređeno stanje u kome su svi spinovi usmereni u istom pravcu. Za razliku od antiferomagnetskog slučaja osnovno stanje feromagneta je identično kvantno-mehaničkom osnovnom stanju.

Nakon što je eksperiment neutronske difrakcije pokazao kakvo je zaista magnetno uređenje u pitanju, došla je i teorijska potvrda sa pretpostavkom da frustracije u magnetnom uređenju mogu biti uklonjene tako što se dozvoli distorzija kristalne rešetke. Ukoliko sa J_1 i J_2 označimo parametre interakcije između prvih, odnosno drugih suseda, možemo dobiti dve vrste osnovnog stanja. Naravno, govorimo o slučaju kada su obe ove interakcije antiferomagnetskog tipa. Kada je $J_1 \gg J_2$ nastupa Nelovo stanje, što je poprilično očigledno jer se prvo pokušava ispuniti uslov da svi prvi susedi imaju antiparalelne orijentacije spinova. U drugom slučaju, kada je $J_1 \ll J_2$ nastupa drugo antiferomagnetno stanje, kolinearna faza, jer atomi gvožđa, koji su drugi susedi, pokušavaju zauzeti antiparalelne orijentacije. Ova konfiguracija spinova je prikazana na slici 1.3 b.

Naravno ovo dovodi do frustracije magnetnog sistema pošto sprečava antiferomagnetsko uređenje između najbližih suseda. Ranije je bilo uočeno da se ovaj problem pravazilazi pojmom distorzije kristalne rešetke, odnosno promene parametara kristalne rešetke. U ovom slučaju dolazi do promene tetragonalne strukture u ravni, čime efektivno prestaje da postoji jedinstveno J_1 . Eksperimentalno izračunata energija i njeno upoređivanje sa teorijski izračunatom iz mo-



Slika 1.3: a) Nelova i b) kolinearna faza

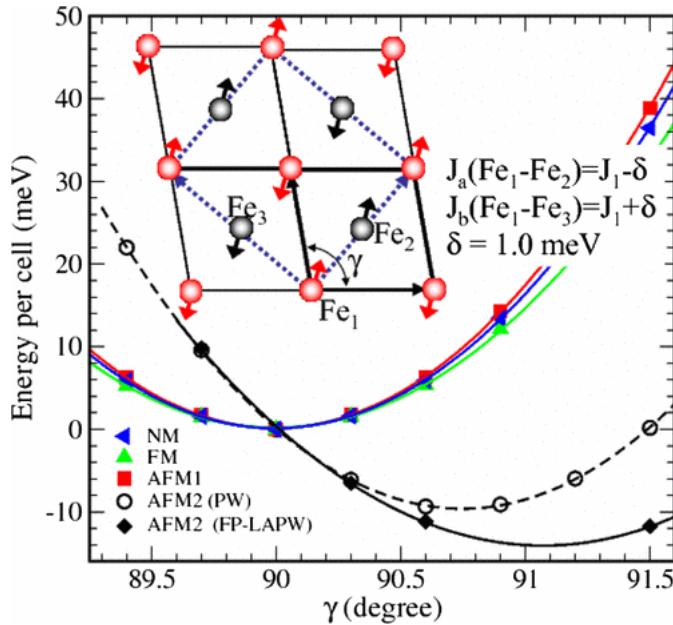
dela $J_1 - J_2$ dala je odnose između ove dve interakcijske konstante. Dobijeno je da važi $2J_2 > J_1$ što takođe predstavlja potvrdu kolinearnog uređenja u osnovnom stanju.

Slučaj distorzije originalne tetragonalne rešetke možemo posmatrati preko promene ugla γ , koji uzima vrednost 90° u nefrustriranom slučaju. U ovom slučaju udaljenost između atoma Fe_1 i Fe_2 se smanjuje, dok se između Fe_1 i Fe_3 povećava. Interakcijska konstanta J_1 postaje veća u a pravcu, dok se smanjuje u b , što je prikazano na slici 1.4. Predstavimo ovo matematički kao $J_{1a} = J_1 + \delta$, odnosno $J_{1b} = J_1 - \delta$. Ovom smenom se ukupna unutrašnja energija kristala smanjuje što predstavlja potvrdu stabilnog stanja u kolinearnoj fazi. Teorijski proračuni u okviru aproksimacije lokalne gustine¹ (*LDA* teorije) daju vrednost ugla $\gamma = 91^\circ$, dok eksperiment ima $\gamma = 90.3^\circ$ [2]. Dakle, kompeticija dva interakcijska integrala J_1 i J_2 , dovodi do ortorombične promene ravanske kristalne strukture jedinjenja *LaOFeAs* što omogućava pojavu uređene antiferomagnetne kolinearne faze.

Kao što smo već rekli kuprati se dobro opisuju ravanskim strukturama, odnosno dvodimenzionim (2D) modelima. U pniktidima to nije slučaj, pošto interakcija između ravni nije zanemarljiva. Zato u Hajzenbergov model moramo ubaciti član koji opisuje interakciju između ravni. Kako je i ona isto antiferomagnetskog karaktera, atomi će zauzimati kolinearan poredak i u ravnima koje sadrže z osu.

Pored ovih članova uvešćemo i član spinske anizotropije ili anizotropije lake ose, $\nu > 0$. On vodi na zavisnost magnetnih osobina od pravca. Laka osa predstavlja pravac u prostoru duž koga je lakše namagnetići materijal. Oba smera tog pravca su podjednako moguća.

¹*LDA* teorija prepostavlja da u svakoj tački molekula gustoća energije odgovara onoj vrednosti koju bi u toj tački imao homogeni elektronski gas čija gustoća elektrona odgovara elektronskoj gustoći u toj tački



Slika 1.4: Ukupna energija po čeliji u zavisnosti od ugla γ za različite vrste uređenja

Spinska anizotropija je uslov za pojavu histerzisa i bez nje Hajzenbergov model bi opisivao superparamagnetik umjesto feromagnetičara.

Kao poslednji korak uvodimo član jednojonske anizotropije ili magnetno-kristalografske anizotropije.

Osnovno stanje klasičnog antiferomagneta je, već pomenuto, Nelovo stanje koje je invariantno samo na rotacije oko z ose (odnosno oko Nelovog vektora² duž kojeg postavljamo z osu). Nelovo stanje nije osnovno stanje kvantnog antiferomagneta. Kvantni antiferomagnet ima osnovno stanje koje se odlikuje kvantnim fluktuacijama, za razliku od Nelovog. Sada je pogodno transformisati Nelovo stanje u feromagnetsko, odnosno preći u lokalni koordinatni sistem. To radimo pomoću unitarnog operatora U_B :

$$U_B = \prod_{\vec{m} \in B} \exp [-i\pi S_{\vec{m}}^x(B)] \quad (1.3)$$

Ovaj operator rotira spinske operatore podrešetke B za ugao $\theta = \pi$ oko S_x ose. Ova transformacija uvodi jedinstvenu osu kvantizacije što pojednostavljuje kasnije račune. Transformacije

² $\vec{N} = \sum_{\vec{n} \in A} \vec{S}_{\vec{n}}(A) - \sum_{\vec{m} \in B} \vec{S}_{\vec{m}}(B)$

spinskih operatora su oblika:

$$\tilde{S}_{\vec{m}}^x(B) = \hat{S}_{\vec{m}}^x(B) \quad \tilde{S}_{\vec{m}}^y(B) = -\hat{S}_{\vec{m}}^y(B) \quad \tilde{S}_{\vec{m}}^z(B) = -\hat{S}_{\vec{m}}^z(B) \quad (1.4)$$

Pošto ćemo hamiltonijan izražavati preko operatora S_n^\pm , potražimo i ove operatore u lokalnom koordinatnom sistemu:

$$\tilde{S}_{\vec{m}}^\pm(B) = \hat{S}_{\vec{m}}^\mp(B) \quad (1.5)$$

Na bazi gore rečenog polazimo od hamiltonijana koji u lokalnom sistemu koordinata ima oblik:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J_{1a} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1x}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^z(B) \right] + \\ & + \frac{J_{1b}}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1y}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^+(A) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^-(A) \right) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^z(A) + (A \rightarrow B) \right] + \\ & + J_c \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_c} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_c}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_c}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_c}^z(B) \right] + \\ & + J_2 \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^z(B) \right] - \\ & - D \sum_{\vec{n}} [(\hat{S}_{\vec{n}}^z(A))^2 + (\hat{S}_{\vec{n}}^z(B))^2] \end{aligned} \quad (1.6)$$

Veličine J_{1a} i J_{1b} predstavljaju konstante izmenske interakcije u ravni, duž x , odnosno y pravca. One su antiferomagnetcog, odnosno feromagnetcog karaktera. Konstanta interakcije J_c u pravcu z ose je antiferomagnetcog karaktera, baš kao i J_2 koja predstavlja interakciju između drugih suseda. Veličina $\eta = 1 + \delta$, gde je δ parametar spinske anizotropije, je, za razliku od ostalih, bezdimenzionalni broj. Poslednja konstanta interakcije je $D > 0$ i ona je parametar jednojonske anizotropije. Vektor \vec{n} je vektor položaja čvora n u kristalnoj rešetki, dok su vektori $\vec{\lambda}_i$, gde je $i \in \{x, y, z\}$ vektori između najbližih suseda u odgovarajućem pravcu. $\vec{\lambda}_2$ je vektor između drugih suseda. Konačno, $\hat{S}(A)$, odnosno $\hat{S}(B)$, su operatori spina u prvoj (drugoj) podrešetki kristala.

Glava 2

Dvodimenzioni Hajzenbergov model sa $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ interakcijom

Kao što smo videli postoje određene analogije između superprovodnih kuprata i železnih pniktida. Pošto se kuprati već opisuju pomoću dvodimenzionih modela, postavlja se pitanje da li je moguć isti pristup pri analiziranju železnih pniktida.

2.1 Bozonizacija i LSW pristup

Posmatrajmo kristal magnetika u termodinamičkoj ravnoteži i izaberimo proizvoljan čvor u njemu. Sada spin na tom čvor otklonimo iz položaja koji predstavlja minimum energije. Usled interakcije sa okolnim spinovima doćiće do promene orijentacije spina i na okolnim čvorovima. Ovaj poremećaj počeće da se prenosi kroz čitavu zapreminu kristala u obliku talasa. Ovakve talase nazivamo spiskim talasima. Energija ovog talasa predstavlja energiju pobuđenja originalnog spina i dobija se tako što frekvenciju ovog talasa $\omega_s(\vec{k})$ pomnožimo sa konstantom \hbar : $\epsilon_s(\vec{k}) = \hbar\omega_s(\vec{k})$. Prema talasno-čestičnom dualizmu možemo ovaj talas povezati sa česticom iste energije i impulsa: $\vec{p} = \hbar\vec{k}$. Ovu česticu zovemo magnon. Kako su spiski talasi i magnoni pobuđenja bozonskog tipa, logično bi bilo pretpostaviti da ih možemo predstaviti bozonskim operatorima.

Postoji više metoda kojim se može izvršiti "bozonizacija" hamiltonijana koji sadrži spin-

ske operatore. U ovom radu ćemo koristiti Holštajn-Primakovljevu transformaciju. Spinski operatori na čvoru i su dati relacijama:

$$\begin{aligned}\hat{S}_i^+ &= \sqrt{2S}(1 - \frac{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i}{2S})^{1/2} \hat{a}_i \\ \hat{S}_i^- &= \sqrt{2S} \hat{a}_i^+ (1 - \frac{\hat{a}_i^+ \hat{a}_i}{2S})^{1/2} \\ \hat{S}_i^z &= S - \hat{a}_i^+ \hat{a}_i\end{aligned}\tag{2.1}$$

Naravno, jasno je da su \hat{a}_i^+ i \hat{a}_i bozonski operatori za koje važe komutacione relacije:

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j^+] = \delta_{i,j} \quad \text{i} \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^+, \hat{a}_j^+] = 0$$

Može se pokazati da komutacione relacije za spinske operatore ($[\hat{S}_i^+, \hat{S}_j^-] = 2\hat{S}_i^z \delta_{i,j}$, $[\hat{S}_i^\pm, \hat{S}_j^\pm] = \mp \hat{S}_i^\pm \delta_{i,j}$) važe i u ovoj reprezentaciji. Dalje, primetićemo da iako svojstvene vrednosti operatora $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$ mogu biti $0, 1, 2, \dots$, svojstvene vrednosti operatora \hat{S}_i^z moraju uzimati vrednosti iz skupa $\{-S, -S+1, \dots, 0, \dots, S\}$. Ovo uvodi ograničenje za svojstvene vrednosti operatora $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i$:

$$\hat{a}_i^+ \hat{a}_i \leq 2S\tag{2.2}$$

Odavde vidimo da je ova transformacija bolja za sisteme sa što većim S ili kada imamo veoma niske temperature, tj. kada je broj ekscitacija mali.

Pojava kvadratnog korena u relacijama koje opisuju transformaciju spinskih operatora može da veoma zakomplikuje dalji račun. Zato se u praksi kvadratni koren razvija u red po argumentu $\hat{a}_i^+ \hat{a}_i / 2S$. U našem radu ćemo zadržati samo prve članove razvoja tako da su izrazi za spinske operatore u bozonskoj reprezentaciji oblika:

$$\begin{aligned}\hat{S}_{\vec{n}}^+(A) &= \sqrt{2S} \hat{a}_{\vec{n}}, & \hat{S}_{\vec{n}}^+(B) &= \sqrt{2S} \hat{b}_{\vec{n}} \\ \hat{S}_{\vec{n}}^-(A) &= \sqrt{2S} \hat{a}_{\vec{n}}^+, & \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) &= \sqrt{2S} \hat{b}_{\vec{n}}^+ \\ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) &= S - \hat{a}_{\vec{n}}^+ \hat{a}_{\vec{n}}, & \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) &= S - \hat{b}_{\vec{n}}^+ \hat{b}_{\vec{n}}\end{aligned}\tag{2.3}$$

Hamiltonian (1.6) očigledno opisuje trodimenzionalni sistem. Kako bi ga sveli na dvodimenzionalni stavićemo $J_c = 0$. Pored toga izostavićemo i član koji opisuje jednojonsku anizotropiju ($D = 0$).

Dvodimenzioni (2D) hamiltonijan je oblika:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J_{1a} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1x}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^z(B) \right] + \\ & + \frac{J_{1b}}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1y}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^+(A) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^-(A) \right) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^z(A) + (A \rightarrow B) \right] + \\ & + J_2 \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^z(B) \right] \end{aligned} \quad (2.4)$$

Zamenimo spinske operatore bozonskim prema relacijama (2.3) i zanemarimo članove oblika $\hat{a}_n^+ \hat{a}_n \hat{a}_n^+ \hat{a}_n$ (proizvode četiri operatora). Zanemarivanjem članova četvrtog reda, mi ustvari zanemarujuemo procese rasejanja spinskih talasa, pa se ova aproksimacija zove i “linear spin wave”(LSW) aproksimacija. Sada ćemo preći u impulsnu sliku, odnosno, izvršićemo Furije transform bozonskih operatora:

$$a_{\vec{n}} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot \vec{n}} \quad \text{i} \quad a_{\vec{n}}^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}} \hat{a}_{\vec{k}}^+ e^{-i\vec{k} \cdot \vec{n}} \quad (2.5)$$

gde je N broj elementarnih celija ili broj magnetnih jona u jednoj podrešetki. Konačno, hamiltonijan (2.4), u impulsnom prostoru je oblika:

$$\hat{H}_{2D} = E_0 + \sum_{\vec{k}} \left[A_{2\vec{k}} (\hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}} + \hat{b}_{\vec{k}}^+ \hat{b}_{\vec{k}}) + B_{2\vec{k}} (\hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{b}_{-\vec{k}}^+ + h.c.) \right] \quad (2.6)$$

gde su:

$$E_0 = -2S^2 \eta (J_{1a} - J_{1b}) N - 4S^2 J_2 N \quad (\text{energija osnovnog stanja}) \quad (2.7)$$

$$A_{2\vec{k}} = 2S \left(\eta (J_{1a} - J_{1b}) + J_{1b} \gamma_{1\vec{k}}^{(y)} + 2J_2 \right) \quad (2.8)$$

$$B_{2\vec{k}} = 2S \left(J_{1a} \gamma_{1\vec{k}}^{(x)} + 2J_2 \Gamma_{2\vec{k}} \right) \quad (2.9)$$

Veličine $\gamma_{1\vec{k}}^{(x)}$, $\gamma_{1\vec{k}}^{(y)}$ i $\Gamma_{2\vec{k}}$ su definisane sledećim izrazima (z_i ($i = x, y$) je broj suseda u tom pravcu,

a z_2 je broj drugih suseda):

$$\gamma_{1\vec{k}}^{(i)} = \frac{1}{z_i} \sum_{\lambda_i} e^{ik_i \lambda_i} = \cos a_i \lambda_i; \quad \Gamma_{2\vec{k}} = \frac{1}{z_2} \sum_{\lambda_2} e^{ik \lambda_2} = \cos k_x a \cos k_y \quad (2.10)$$

Definišimo Grinove funkcije za operatore $\hat{a}_{\vec{k}}$ i $\hat{b}_{-\vec{k}}$:

$$\begin{aligned} G_{\vec{k},\vec{q}}^a(t) &\equiv \langle \langle \hat{a}_{\vec{k}}(t) | \hat{a}_{\vec{q}}^+(0) \rangle \rangle = \theta(t) \langle [\hat{a}_{-\vec{k}}(t), \hat{a}_{\vec{q}}^+(0)] \rangle \\ G_{-\vec{k},\vec{q}}^b &\equiv \langle \langle \hat{b}_{-\vec{k}}^+(t) | \hat{a}_{\vec{q}}^+(0) \rangle \rangle = \theta(t) \langle [\hat{b}_{-\vec{k}}^+(t), \hat{a}_{\vec{q}}^+(0)] \rangle \end{aligned} \quad (2.11)$$

Uradimo sada jednačine kretanja za ove Grinove funkcije kako bismo dobili njihove konkretne oblike. Nadalje, za konstantu \hbar uzećemo da je jednaka 1. Dobijeni sistem jednačina je oblika:

$$\begin{aligned} (E - A_{2\vec{k}})G_{\vec{k},\vec{q},E}^a - B_{2\vec{k}}G_{\vec{k},\vec{q},E}^b &= \frac{i}{2\pi} \\ B_{2\vec{k}}G_{\vec{k},\vec{q},E}^a + (E + A_{2\vec{k}})G_{\vec{k},\vec{q},E}^b &= 0 \end{aligned} \quad (2.12)$$

Izraze za Grinove funkcije dobijamo rešavanjem ovog sistema jednačina. Koristićemo dobro poznato Kramerovo pravilo. Elementarna pobuđenja definišu polovi Grinovih funkcija:

$$E(\vec{k}) = \pm \sqrt{A_{2\vec{k}}^2 - B_{2\vec{k}}^2} \quad (2.13)$$

sa već definisanim izrazima za $A_{2\vec{k}}$ (2.8) i $B_{2\vec{k}}$ (2.9).

Usrednjavanjem izraza za \hat{S}^z operator u (2.1), za magnetizaciju sistema možemo pisati:

$$\langle S^z \rangle = S - \langle \hat{a}_n^+ \hat{a}_n \rangle \quad (2.14)$$

Korelacionu funkciju $\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle$ možemo dobiti iz sprektralne teoreme o Grinovim funkcijama:

$$\langle \hat{a}_k^+ \hat{a}_k \rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dE \frac{G^a(k, E + i\epsilon) - G^a(k, E - i\epsilon)}{e^{\frac{E}{\theta}} - 1}, \quad \theta = k_B T \quad (2.15)$$

Grinove funkcije dobijamo iz sistema jednačina (2.11):

$$G^a(k, E) = \frac{i}{2\pi} \frac{1}{2E_k} \left[\frac{E_k + A_{2k}}{E - E_k} + \frac{E_k - A_{2k}}{E + E_k} \right] \quad (2.16)$$

Uvrstimo ove izraze u jednačinu za korelacionu funkciju (2.14) i koristeći razvoj $\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mathcal{P}\frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$, dobijamo:

$$\langle S^z \rangle = S - \frac{1}{2N} \sum_k \left[\frac{A_{2k}}{E_k} \coth \frac{E_k}{2\theta} - 1 \right] \quad (2.17)$$

Magnetizaciju na apsolutnoj nuli dobijamo ako potražimo limes kada $\theta \rightarrow 0$ ($\coth E_k/2\theta \rightarrow 1$):

$$\langle S^z \rangle_0 = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_k \frac{A_{2k}}{E_k} \quad (2.18)$$

Možemo još potražiti brzine spinskih talasa u pravcima (x, y) . Razvijanjem izraza za energiju elementarnih pobuđenja E_k do kvadratnog stepena dobijamo izraz:

$$E_k^2 \approx v_x^2 k_x^2 + v_y^2 k_y^2$$

Upoređujući članove sa leve i desne strane dobijamo izraz za spinske brzine:

$$v_x = 2S(2J_2 + J_{1a}) \quad (2.19)$$

$$v_y = 2S \sqrt{4J_2^2 + 2J_{1a}J_2 - 2J_{1b}J_2 + J_{1b}^2(\eta - 1) - \eta J_{1a}J_{1b}} \quad (2.20)$$

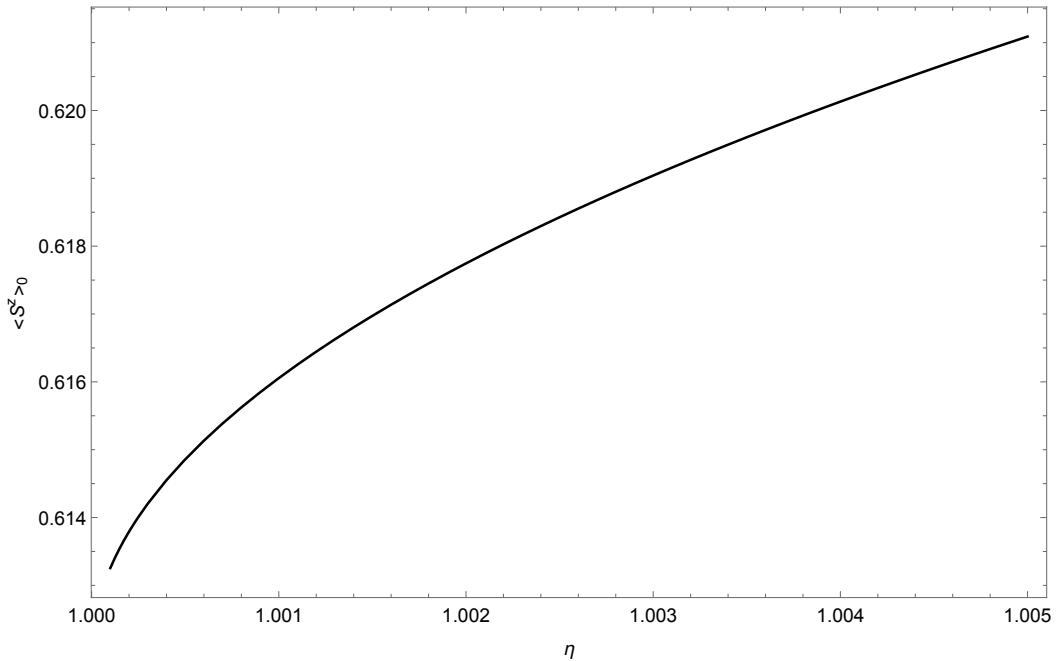
odnosno, u specijalnom slučaju $\eta = 1$

$$v_x = 2S(2J_2 + J_{1a}) \quad (2.21)$$

$$v_y = 2S \sqrt{(2J_2 + J_{1a})(2J_2 - J_{1b})} \quad (2.22)$$

2.1.1 Numerički rezultati

U ovom poglavlju biće predstavljena numerička analiza prethodno dobijenih rezultata ovog modela. Počnimo od magnetizacije na 0 K. Na slici 2.1 je predstavljen grafik magnetizacije u



Slika 2.1: Magnetizacija sistema na 0 K

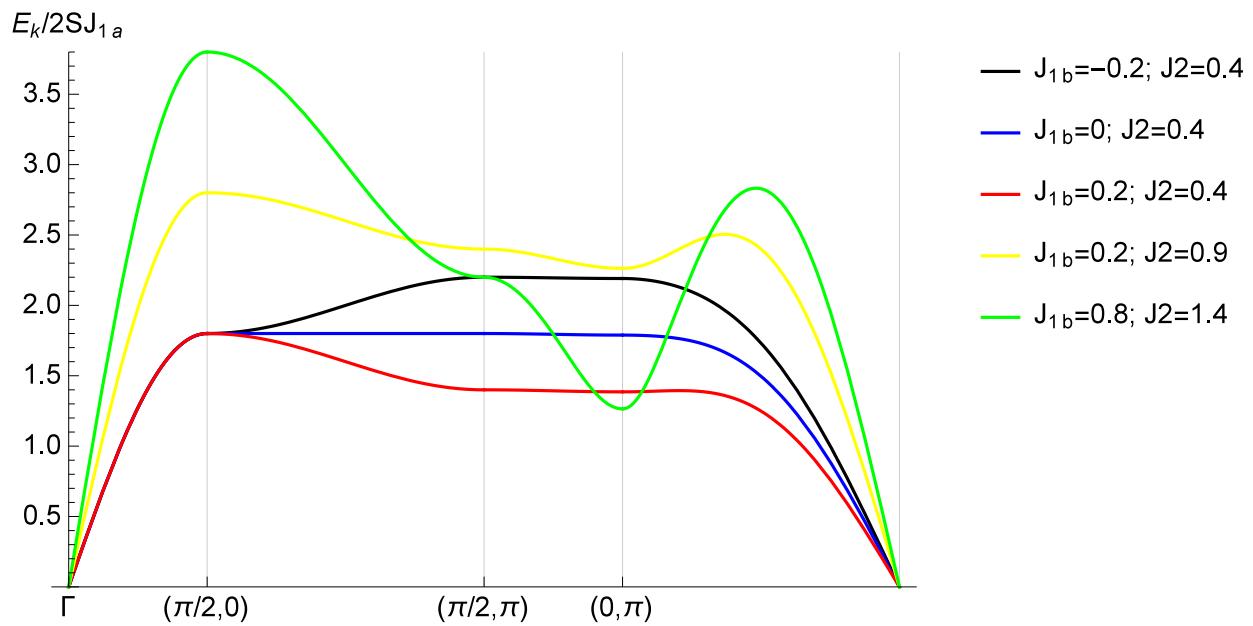
zavisnosti od parametra anizotropije $\eta = 1 + \delta$.

Sa slike je lako primetiti da je magnetizacija monotono rastuća funkcija od parametra anizotropije η . Ona uzima vrednosti od 0.613 do 0.621, što će biti slučaj i za ostale modele. Vidimo da, iako bismo očekivali da vrednosti magnetizacije bude (u klasičnom, Nelovom, osnovnom stanju) $\langle S^z \rangle = 1$ ona je manja. Ovo je posledica postojanja kvantnih fluktuacija koje narušavaju uređenost sistema.

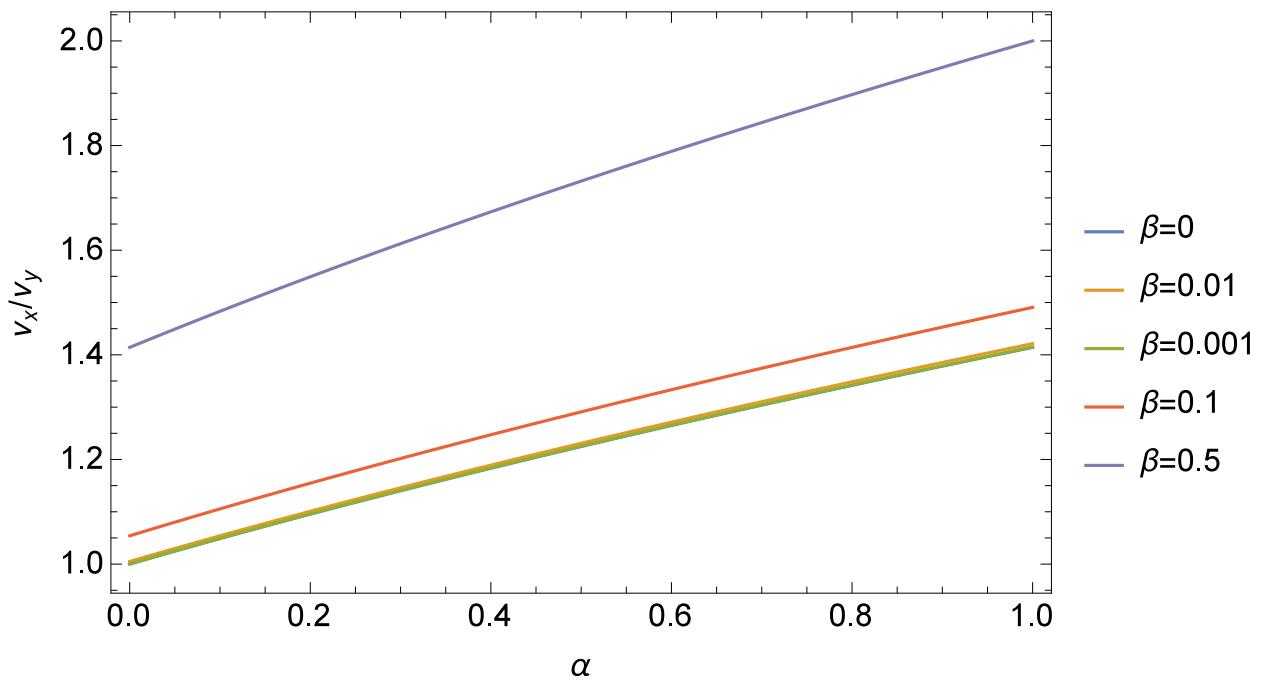
Sada ćemo analizirati energijski spektar spinskih talasa duž određenih pravaca. Uzeli smo da je $\delta = 0$ tako da nema gepa. Vrednosti ostalih koeficijenata interakcije su date u desnom delu grafika. Primećujemo da prva tri izbora parametara imaju slične vrednosti energija, identične u prvom segmentu grafika ($y = 0$, $x = (0, \pi/2)$). Druga dva modela, koji imaju više vrednosti parametara interakcije, se dosta razlikuju od ostalih modela, kako po vrednostima energija, tako i po obliku disperzije. Vidimo da oni imaju izražene minimume i maksimume za razliku od prva tri modela.

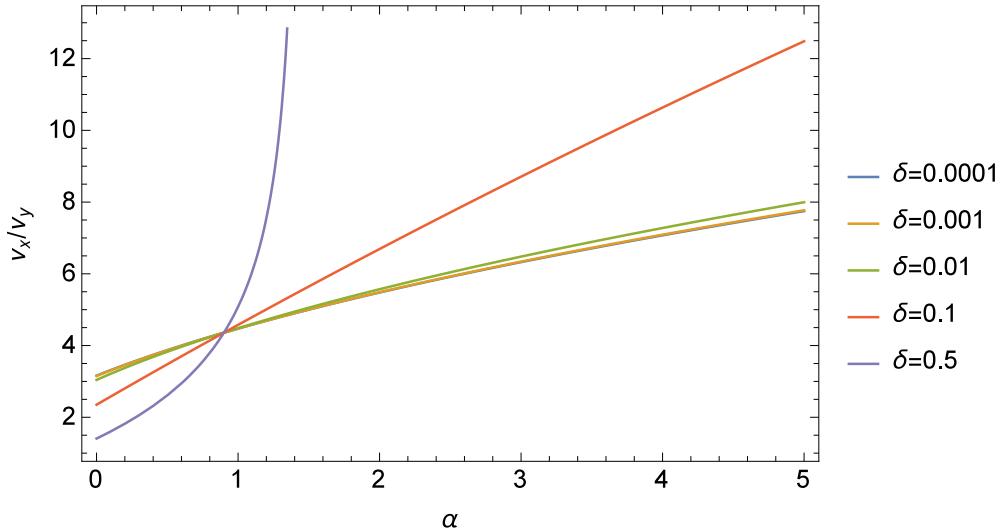
Proverimo sada odnose brzina spinskih talasa v_x/v_y za razne vrednosti parametara.

Na slici 2.4 vidimo odnose brzina v_x/v_y u funkciji od $\alpha = \frac{J_{1a}}{J_2}$, za različite vrednosti $\beta = \frac{J_{1b}}{J_2}$. Parametar anizotropije je uzet da je nula, odnosno $\eta = 1$. Sa slike primećujemo gotovo linearnu zavisnost u odnosu na α . Sa promenom parametra β oblik zavisnosti se ne menja drastično, ali



Slika 2.2: Disperzija spinskih talasa

Slika 2.3: Odnos brzina spinskih talasa za različite vrednosti β



Slika 2.4: Odnos brzina spinskih talasa za različite vrednosti δ

postoji pomeraj ka većim vrednostima.

Na slici 2.3 su prikazani odnosi brzina u zavisnosti od α , za različite parametre anizotropije δ . Za parametar β uzeta je konstantna vrednost $\beta = 0.9$. Za $\beta > 1$, ovi odnosi imaju isključivo imaginarnе vrednosti. Sa slike vidimo da anizotropijski parametar ima i te kako uticaja na odnose brzina, što je i razumljivo pošto samo v_y zavisi od njega. Za vrednost $\delta = 0.1$ grafik ima gotovo linearan karakter, dok za $\delta = 0.5$ ima divergenciju oko vrednosti $\alpha = 1.45$. Za vrednost $\alpha = 0.9$ sve se krive sekut.

2.2 Spinski formalizam i RPA aproksimacija

Ponovo podimo od hamiltonijana (2.4) i definišimo dve nove Grinove funkcije:

$$\begin{aligned} G_1(\vec{x}, t) &\equiv \langle \langle \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) | \hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \rangle \rangle = \theta(t) \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^+(A), \hat{S}_{\vec{n}}^-(A)] \rangle \\ G_2(\vec{x}, t) &\equiv \langle \langle \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) | \hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \rangle \rangle = \theta(t) \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^-(B), \hat{S}_{\vec{n}}^-(A)] \rangle \end{aligned} \quad (2.23)$$

Postavimo jednačine kretanja za gore navedene Grinove funkcije:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_1(\vec{x}, t) = i\hbar \delta(t) \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^+(A), \hat{S}_{\vec{n}}^-(A)] \rangle + \theta(t) \langle [i\hbar \frac{d\hat{S}_{\vec{n}}^+(A)}{dt}, \hat{S}_{\vec{n}}^-(A)] \rangle \quad (2.24)$$

Potražimo sada jednačine kretanja za operatore $\hat{S}_{\vec{n}}^+(A)$ i $\hat{S}_{\vec{n}}^-(B)$. Konačno dobijamo:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{S}_{\vec{n}}^+(A)}{dt} &= [\hat{S}_{\vec{n}}^+(A), \hat{H}] = J_{1a} \sum_{\vec{\lambda}_{1x}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^-(B) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^z(B) \right\} + \\ &+ J_{1b} \sum_{\vec{\lambda}_{1y}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^+(A) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^z(A) \right\} + \\ &+ J_2 \sum_{\lambda_2} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^-(B) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^z(B) \right\} \\ i\hbar \frac{d\hat{S}_{\vec{n}}^-(B)}{dt} &= [\hat{S}_{\vec{n}}^-(B), \hat{H}] = -J_{1a} \sum_{\vec{\lambda}_{1x}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^+(A) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^z(A) \right\} - \\ &- J_{1b} \sum_{\vec{\lambda}_{1y}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^-(B) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^z(B) \right\} - \\ &- J_2 \sum_{\lambda_2} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^+(A) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^z(A) \right\} \end{aligned} \quad (2.25)$$

Izvršimo sada vremenski Furije transform Grinove funkcije:

$$G_1(\vec{x}, t - t') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G_1(\vec{x}, \omega) \quad (2.26)$$

Ovde možemo lako uraditi vremenski izvod Grinove funkcije što daje:

$$\frac{d}{dt} G_1(\vec{x}, t - t') = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \omega G_1(\vec{x}, \omega)$$

Do ovog koraka ovaj metod nije dao nijedan konkretni rezultat, štaviše dobili smo dve nove nepoznate Grinove funkcije. Dalje, na isti način možemo potražiti jednačine kretanja za te dve nove Grinove funkcije, što bi rezultovalo pojavljivanjem dve više Grinove funkcije. Postaje jasno da se ovako dobija beskonačan lanac viših Grinovih funkcija. U praksi se ovaj problem rešava presecanjem lanca Grinovih funkcija na određenom mestu, izražavanjem više Grinove funkcije nižom, tzv. dekuplovanje. Postoji više modela ili oblika dekuplovanja i mi ćemo ovde koristiti najčešći i najsigurniji metod, aproksimacija slučajnih faza, (“Random Phase Approximation”, RPA). Ona se sastoji u sledećem:

$$\langle\langle \hat{S}_{\vec{n}}^z \hat{S}_{\vec{m}}^+ | \hat{S}_{\vec{n}'}^- \rangle\rangle \approx \langle \hat{S}_{\vec{n}}^z \rangle \langle\langle \hat{S}_{\vec{m}}^+ | \hat{S}_{\vec{n}'}^- \rangle\rangle \quad (2.27)$$

Uzimajući da Grinova funkcija zavisi samo od rastojanja između čvorova (homogena rešetka) razvijimo je u Furije red po vektorima recipročne rešetke:

$$G_1(\vec{n} - \vec{n}', \omega) = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} e^{i\vec{k} \cdot (\vec{n} - \vec{n}')} G_1(\vec{k}, \omega) \quad (2.28)$$

Nakon što odradimo sve ove korake za Grinove funkcije dolazimo do sistema jednačina oblika:

$$(E - C_{2k})G_1(\vec{k}, E) - D_{2k}G_2(\vec{k}, E) = \frac{i}{2\pi} 2\sigma \quad (2.29a)$$

$$D_{2k}G_1(\vec{k}, E) + (E + C_{2k})G_2(\vec{k}, E) = 0 \quad (2.29b)$$

Ovde je $\sigma = \langle \hat{S}^z \rangle$ parametar uređenosti, odnosno magnetizacija, dok su koeficijenti C_{2k} i D_{2k} dati izrazima:

$$C_{2k} = 2\sigma(\eta(J_{1a} - J_{1b} + 2J_2) - J_{1b}\gamma_{1k}^y) \quad (2.30a)$$

$$D_{2k} = 2\sigma(J_{1a}\gamma_{1k}^x + 2J_2\Gamma_{2k}) \quad (2.30b)$$

Izraze za γ_{1k}^i i Γ_{2k} smo naveli u prethodnoj glavi (2.10). Energija elementarnih ekscitacija u ovom slučaju je:

$$E_k = \sqrt{C_{2k}^2 - D_{2k}^2} \quad (2.31)$$

Magnetizaciju sistema čemo dobiti koristeći Kalenov izraz za magnetizaciju [9]. On je oblika:

$$\sigma = \frac{(S - \Phi)(1 + \Phi)^{2S+1} + (S + 1 + \Phi)\Phi^{2S+1}}{(1 + \Phi)^{2S+1} - \Phi^{2S+1}}, \quad (2.32)$$

što u slučaju $S = 1$ daje:

$$\sigma = \frac{1 + 2\Phi}{1 + 3\Phi + 3\Phi^2} \quad (2.33)$$

Gore navedenu veličinu Φ dobijamo iz korelacione funkcije: $\langle S^-(A)S^+(A) \rangle = \sigma\Phi$. Korelacionu funkciju dobijamo postupkom već objašnjениm u prethodnoj glavi. Konačan izraz za Φ :

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{C_{2k}}{E_k} \coth \frac{E_k}{2\theta} - 1 \right) \quad (2.34)$$

Kada $T \rightarrow 0$ dobijamo izraz za veličinu Φ na apsolutnoj nuli:

$$\Phi_0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{C_{2k}}{E_k} - 1 \quad (2.35)$$

U slučaju da $\theta \rightarrow \theta_N$, Nelovoj temperaturi, magnetizacija postaje mala, odnosno $\sigma \ll 1$, te možemo kotangens aproksimirati prvim članom razvoja u red $\coth x \approx \frac{1}{x}$. Uvrštavanjem ovog izraza u magnetizaciju i rešavanjem te jednačine po θ_N dobijamo izraz za kritičnu temperaturu sistema:

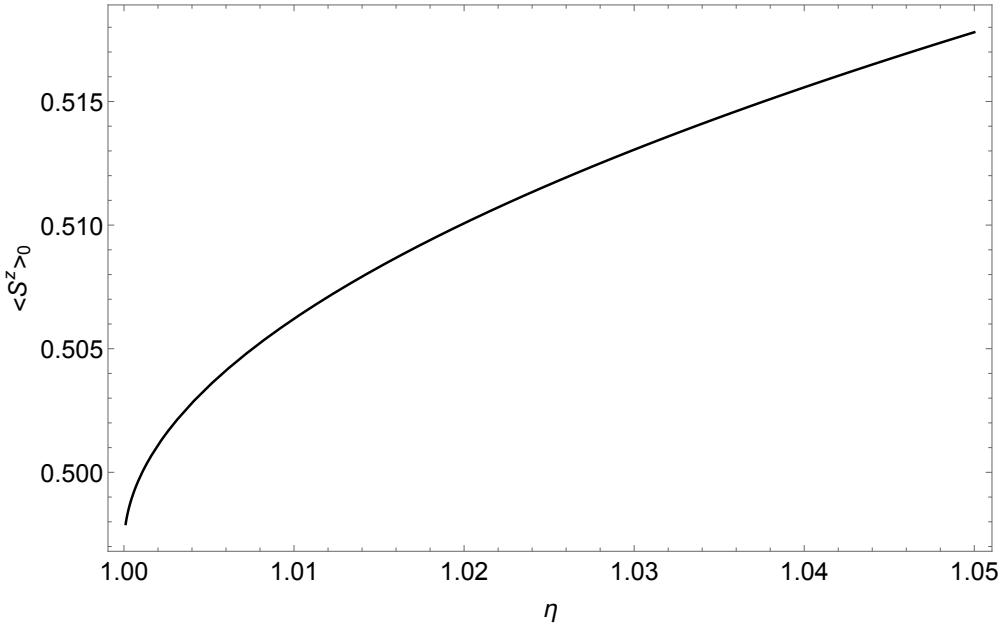
$$\theta_N = \frac{2}{3} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} C_{2k}/E_k^2} \quad (2.36)$$

Kao u prethodnom poglavlju možemo izračunati brzine spinskih talasa i naći njihove odnose.

Konačno nalazimo odnose brzina:

$$v_y/v_x = \sqrt{\frac{4 - \beta^2 + 2\alpha - \beta(\eta(\alpha - \beta) + 2)}{4(\alpha + 1) + \alpha^2}} \quad (2.37)$$

gde je $\alpha = \frac{J_{1a}}{J_2}$ i $\beta = \frac{J_{1b}}{J_2}$.

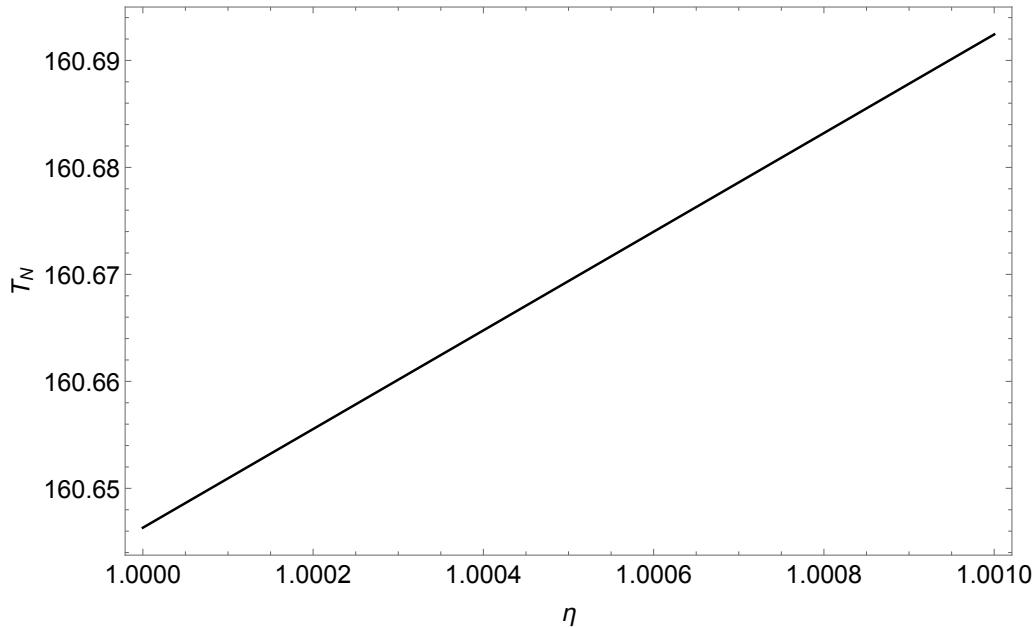
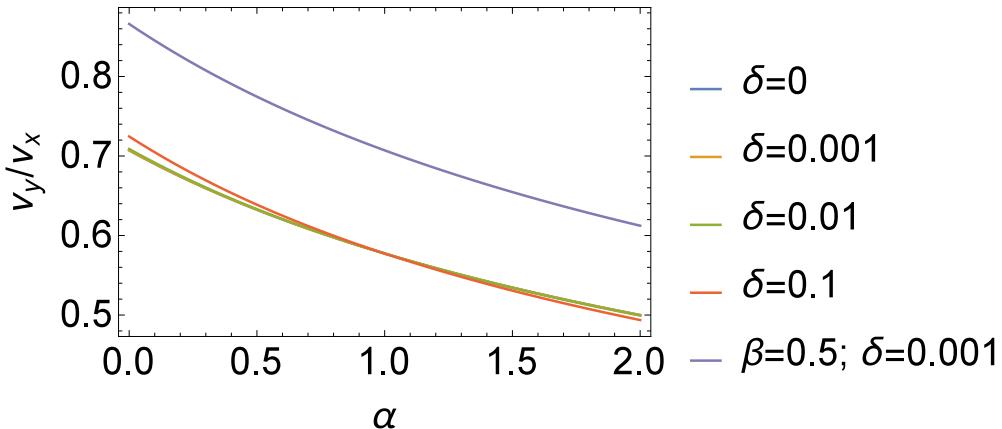


Slika 2.5: Magnetizacija u RPA aproksimaciji na $0K$

2.2.1 Numerički rezultati

Sada ćemo predstaviti numeričku analizu rezultata dobijenih u prethodnom poglavlju. Na slici 2.5 vidimo kako se ponaša magnetizacija na absolutnoj nuli u zavisnosti od parametra anizotropije $\eta = 1 + \delta$. Magnetizacija raste sa povećanjem η , što je bio i osnovni rezultat prethodnog metoda. Za razliku od magnetizacije dobijene bozonizacijom hamiltonijana u okviru Blohove aproksimacije sada σ uzima nešto niže vrednosti ($0.495 - 0.515$).

Pogledajmo sada i rezultate za Nelovu temperaturu (T_N). Za parametre J_{1a}, J_{1b}, J_2 smo koristili rezultate iz reference [7] ($J_{1a} = 50$ meV, $J_{1b} = 49$ meV, $J_2 = 26$ meV). Za ovaj skup parametara grafik kritične temperature je prikazan na slici 2.6. Kritična temperatura je monotono rastuća funkcija anizotropijskog parametra η , što potvrđuje činjenicu da ovako izabran anizotropijski parametar preferira kolinearan antiferomagnetni poredak. Eksperimentalna vrednost kritične temperature za ovo jedinjenje iznosi 138 K i za ovaj model to odgovara parametru anizotropije $\eta = 0.5581$. Ovako visoka vrednost parametra anizotropije je neočekivana. Za ovu vrednost η dobijamo da je $\delta = -0.4419$, što je u suprotnosti sa osnovnom postavkom modela, tj. da $\delta > 0$. Ovakav rezultat za δ ne opisuje anizotropiju lake ose. U Uvodu smo rekli da se ova grupa jedinjenja mnogo bolje opisuje 3D modelima i ovo može predstavljati putokaz

Slika 2.6: Nelova temperatura u zavisnosti od η Slika 2.7: Odnosi brzina za razne vrednosti δ

da je to razmišljanje ispravno.

Hajdemo još pogledati kako izgledaju odnosi brzina za razne vrednosti parametara. Na slici 2.7 je predstavljena zavisnost odnosa brzina za različite vrednosti $\delta = \eta - 1$ pri konstantnom $\beta = 1$. Sa slike se može zaključiti da parametar anizotropije ne utiče mnogo na oblik zavisnosti ovog odnosa.

Glava 3

Trodimenzioni anizotropni

Hajzenbergov $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ model

U ovom delu ćemo proučavati trodimenzioni anizotropni hamiltonijan sa $J_{1a} - J_{1b} - J_{1c} - J_2$ interakcijom. Prvo ćemo posmatrati hamiltonijan sa jednostavnom spinskrom anizotropijom u formalizmu spinskih operatora i linearnih spinskih talasa. Zatim ćemo preći na model sa jednojonskom anizotropijom, koji ćemo rešavati metodom Grinovih funkcija koje ćemo dekuplovati Anderson-Kalen i Tjablikovskim dekuplovanjem.

3.1 Trodimenzioni hamiltonijan sa spinskem anizotropijom

Hamiltonijan ovog sistema ima oblik:

$$\begin{aligned}
 \hat{H} = & J_{1a} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1x}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1x}}^z(B) \right] + \\
 & + \frac{J_{1b}}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1y}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^+(A) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^-(A) \right) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_{1y}}^z(A) + (A \rightarrow B) \right] + \\
 & + J_c \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_c} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_c}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_c}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_c}^z(B) \right] + \\
 & + J_2 \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\vec{n}}^-(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^-(B) + \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda}_2}^z(B) \right]
 \end{aligned} \tag{3.1}$$

Kao što vidimo sada imamo član koji opisuje interakciju duž z pravca. Ovaj hamiltonijan, kao i u prethodnoj glavi, ćemo izraziti na dva načina: “bozonizacijom” hamiltonijana u Blohovoj aproksimaciji i u formalizmu spinskih operatora u aproksimaciji RPA.

3.1.1 Bozonizacija 3D hamiltonijana

Pošto već imamo rezultate za dvodimenzioni hamiltonijan, zapišimo hamiltonijan (3.1) u obliku:

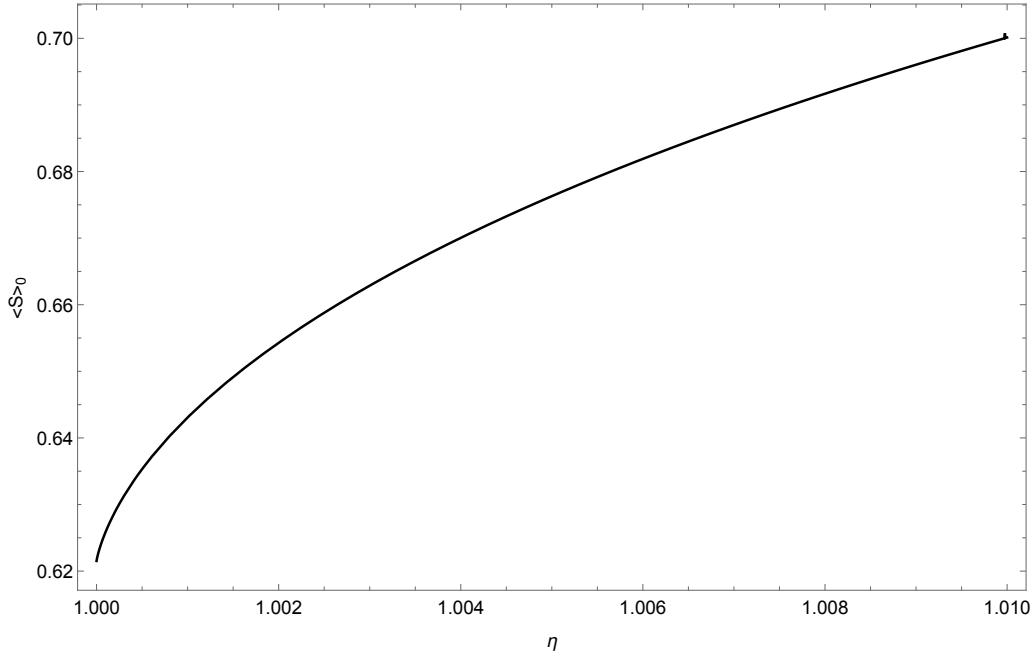
$$\hat{H}_{3D} = \hat{H}_{2D} + \hat{H}_c$$

gde \hat{H}_c opisuje interakciju u z pravcu i u impulsnom prostoru on ima oblik:

$$\hat{H}_c = J_c \sum_{\vec{k}} \left[2S\gamma_{1k}^{(z)} (\hat{a}_k^+ \hat{b}_{-k}^+ + \hat{a}_k^- \hat{b}_{-k}^-) + 2\eta S (\hat{a}_k^+ \hat{a}_k^- + \hat{b}_k^+ \hat{b}_k^-) \right] - 2\eta J_{1c} S^2 N \tag{3.2}$$

Konačan hamiltonijan ima isti oblik kao u prvom delu samo sa različitim koeficijentima:

$$\hat{H}_{3D} = E_0 + \sum_{\vec{k}} \left[A_{3\vec{k}} (\hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{a}_{\vec{k}}^- + \hat{b}_{\vec{k}}^+ \hat{b}_{\vec{k}}^-) + B_{3\vec{k}} (\hat{a}_{\vec{k}}^+ \hat{b}_{-\vec{k}}^+ + h.c.) \right] \tag{3.3}$$



Slika 3.1: Magnetizacija 3D modela u LSW pristupu

gde su novi koeficijenti:

$$E_0 = -2S^2\eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2)N \quad (\text{energija osnovnog stanja}) \quad (3.4a)$$

$$A_{3\vec{k}} = 2S[\eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2) + J_{1b}\gamma_{1\vec{k}}^{(y)}] \quad (3.4b)$$

$$B_{3\vec{k}} = 2S[J_{1a}\gamma_{1\vec{k}}^{(x)} + J_{1c}\gamma_{1\vec{k}}^{(z)} + 2J_2\Gamma_{2\vec{k}}] \quad (3.4c)$$

Postupajući analogno kao u prethodnoj glavi, za energiju elementarnih ekscitacija dobijamo izraz:

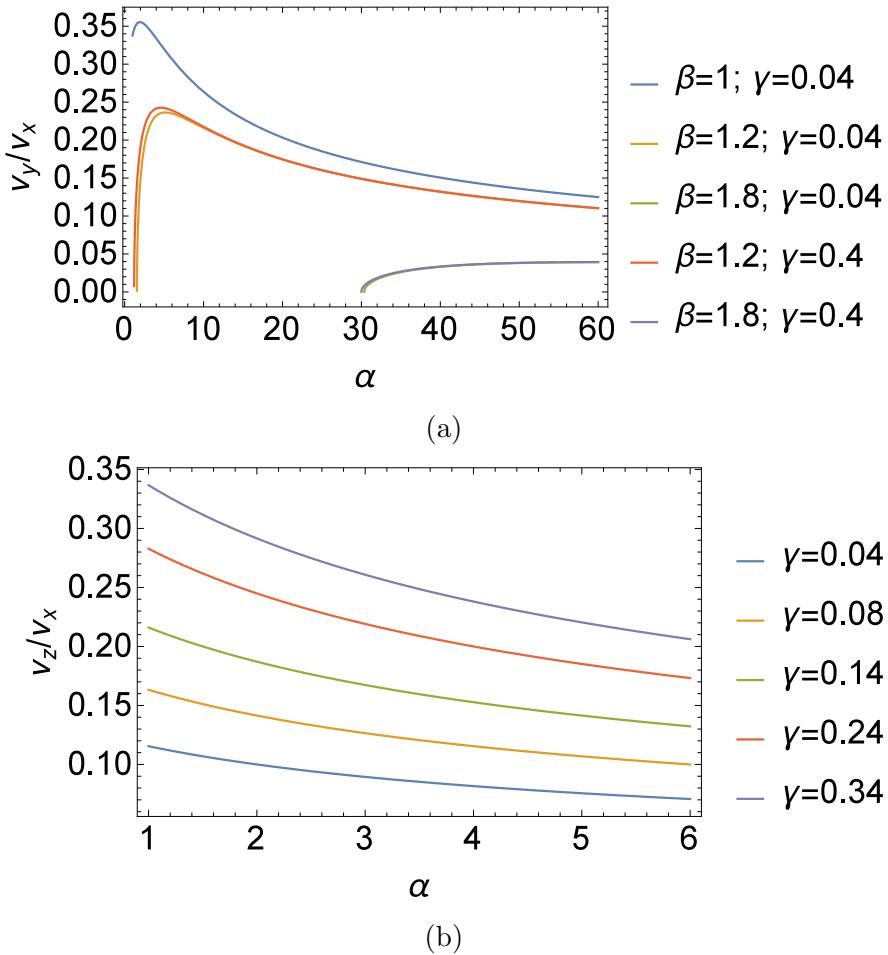
$$E(\vec{k}) = \sqrt{A_{3\vec{k}}^2 - B_{3\vec{k}}^2} \quad (3.5)$$

Magnetizacija na konačnoj temperaturi i na apsolutnoj nuli ima sledeći oblik:

$$\langle S \rangle = S - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{A_{3k}}{E_k} \coth \frac{E_k}{2\theta} - 1 \right) \quad (3.6a)$$

$$\langle S \rangle_0 = S + \frac{1}{2} - \frac{1}{2N} \sum_{\vec{k}} \frac{A_{3k}}{E_k} \quad (3.6b)$$

Na slici 3.1 prikazan je grafik zavisnosti magnetizacije na 0 K od η . Vrednosti parametara interakcije su uzeti iz rada [7]. Magnetizacija, kao što je i očekivano, raste sa porastom



Slika 3.2: (a) Odnosi brzina v_y/v_x za različite parametre interakcije. (b) Odnosi brzina v_z/v_x za različite vrednosti γ

parametra anizotropije.

Postupak dobijanja izraza za brzine spinskih talasa je opisan u prethodnom delu. Ovde navodimo samo konačne izraze (u jedinicama J_2):

$$v_x = 2S\sqrt{(\alpha + 2)(\alpha + \gamma + 2)} \quad (3.7a)$$

$$v_y = 2S\sqrt{(2 - \beta\eta)(\alpha + \gamma + 2) - \beta^2(\eta + 1) + \alpha\gamma} \quad (3.7b)$$

$$v_z = 2S\sqrt{\gamma(\alpha + \gamma + 2)} \quad (3.7c)$$

gde su, kao i u prošlom delu, $\alpha = J_{1a}/J_2$, $\beta = J_{1b}/J_2$ i $\gamma = J_{1c}/J_2$.

Na slici 3.2 prikazan je odnos brzina za različite parametre interakcije. Slika 3.2 a prikazuje odnos brzina v_y/v_x u zavisnosti od α za razne parametre. Primetićemo odmah da za $\beta > 2$ ovaj odnos ima imaginarne vrednosti što ukazuje na promenu osnovnog stanja. Sa grafika možemo

videti da ovi odnosi imaju maksimume za $\alpha \approx 2$. Dalje, primećujemo da su za parametar $\beta = 1.8$ ovi odnosi imaginarni za $\alpha < 30$. Slika 3.2 b pokazuje da parametar anizotropije nema uticaja na oblik zavisnosti kao ni na vrednosti odnosa. Odnos v_z/v_x ne zavisi od β što se vidi i iz izraza za ove veličine.

3.1.2 Trodimenzioni hamiltonijan u spinskem formalizmu

Sada ćemo, analogno postupku iz prošle glave, uraditi analizu hamiltonijana (3.1) u okviru spinskog formalizma. Definišimo Grinove funkcije za operatore $\hat{S}_{\vec{n}}^+(A)$ ($G_1(\vec{n} - \vec{n}', t - t')$) i $\hat{S}_{\vec{n}}^-(B)$ ($G_2(\vec{n} - \vec{n}', t - t')$). Polazimo od jednačina kretanja za navedene Grinove funkcije:

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_1(\vec{n} - \vec{n}', t - t') = i\hbar \delta(t - t') \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^+(A), \hat{S}_{\vec{n}'}^-(A)] \rangle + \theta(t - t') \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^+(A), \hat{H}_{3D}], \hat{S}_{\vec{n}'}^-(A) \rangle \quad (3.8a)$$

$$i\hbar \frac{d}{dt} G_2(\vec{n} - \vec{n}', t - t') = i\hbar \delta(t - t') \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^-(B), \hat{S}_{\vec{n}'}^-(A)] \rangle + \theta(t - t') \langle [\hat{S}_{\vec{n}}^-(B), \hat{H}_{3D}], \hat{S}_{\vec{n}'}^-(A) \rangle \quad (3.8b)$$

Jednačine kretanja za operatore $\hat{S}_{\vec{n}}^+(A)$ i $\hat{S}_{\vec{n}}^-(B)$ imaju oblik:

$$\begin{aligned} i\hbar \frac{d\hat{S}_{\vec{n}}^+(A)}{t} &= [\hat{S}_{\vec{n}}^+(A), \hat{H}] = J_{1a} \sum_{\vec{\lambda_{1x}}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1x}}}^-(B) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1x}}}^z(B) \right\} + \\ &\quad + J_{1b} \sum_{\vec{\lambda_{1y}}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1y}}}^+(A) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1y}}}^z(A) \right\} + \\ &\quad + J_{1c} \sum_{\vec{\lambda_{1c}}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1c}}}^-(B) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1c}}}^z(B) \right\} + \\ &\quad + J_2 \sum_{\vec{\lambda_2}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_2}}^-(B) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^+(A) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_2}}^z(B) \right\} \\ i\hbar \frac{d\hat{S}_{\vec{n}}^-(B)}{t} &= [\hat{S}_{\vec{n}}^-(B), \hat{H}] = -J_{1a} \sum_{\vec{\lambda_{1x}}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1x}}}^+(A) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1x}}}^z(A) \right\} + \\ &\quad - J_{1b} \sum_{\vec{\lambda_{1y}}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1y}}}^-(B) - \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1y}}}^z(B) \right\} + \\ &\quad - J_{1c} \sum_{\vec{\lambda_{1c}}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1c}}}^+(A) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_{1c}}}^z(A) \right\} + \\ &\quad - J_2 \sum_{\vec{\lambda_2}} \left\{ \hat{S}_{\vec{n}}^z(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_2}}^+(A) + \eta \hat{S}_{\vec{n}}^-(B) \hat{S}_{\vec{n}+\vec{\lambda_2}}^z(A) \right\} \end{aligned}$$

Nakon vremenske Furije transformacije i prelaska u recipročni prostor dobijamo sistem jednačina:

$$(E - A_{3k})G_1(\vec{k}, E) - B_{3k}G_2(\vec{k}, E) = \frac{1}{2\pi}2\sigma \quad (3.9a)$$

$$B_{3k}G_1(\vec{k}, E) + (E + A_{3k})G_2(\vec{k}, E) = 0 \quad (3.9b)$$

gde je $\sigma = \langle \hat{S}^z \rangle$, dok su koeficijenti dati sa:

$$A_{3k} = 2\sigma(\eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2) + J_{1b}\gamma_{1k}^{(y)}) \quad (3.10)$$

$$B_{3k} = 2\sigma(J_{1a}\gamma_{1k}^{(x)} + J_{1c}\gamma_{1k}^{(z)} + 2J_2\Gamma_{2k}) \quad (3.11)$$

Energije elementarnih ekscitacija su:

$$E_k = \sqrt{A_{3k}^2 - B_{3k}^2} \quad (3.12)$$

Magnetizacija je data izrazom (2.19). Veličina Φ je oblika:

$$\Phi = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \left(\frac{A_{3k}}{E_k} \coth \frac{E_k}{2\theta} - 1 \right) \quad (3.13)$$

U slučaju niskih temperatura kotangens teži jedinici ($\coth \frac{E_k}{2\theta} \rightarrow 1$), pa je Φ_0 :

$$\Phi_0 = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \frac{A_{3k}}{E_k} - 1 \quad (3.14)$$

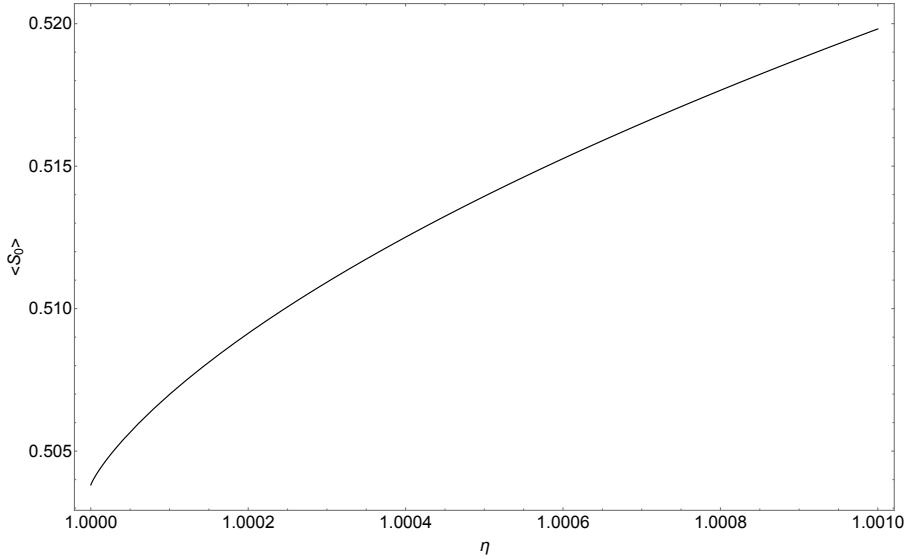
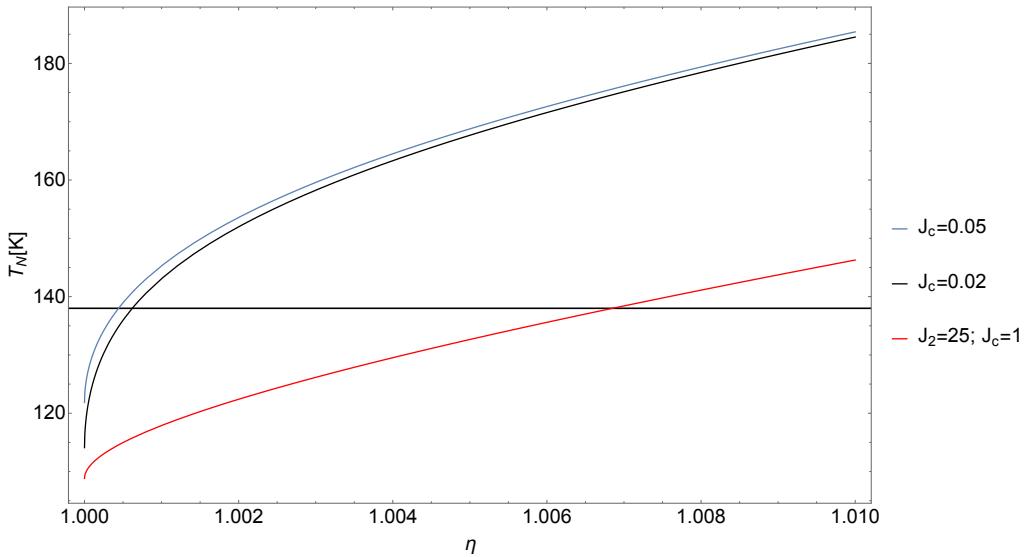
Na slici 3.3 je prikazana zavisnost magnetizacije na 0 K od parametra anizotropije $\eta = 1 + \delta$.

Vrednosti ostalih parametara su uzete iste kao i ranije.

Za kritičnu temperaturu ovog modela dobijamo sledeći izraz:

$$T_N = \frac{2}{3k_B} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \widetilde{\frac{A_{3k}}{E_k}}} \quad (3.15)$$

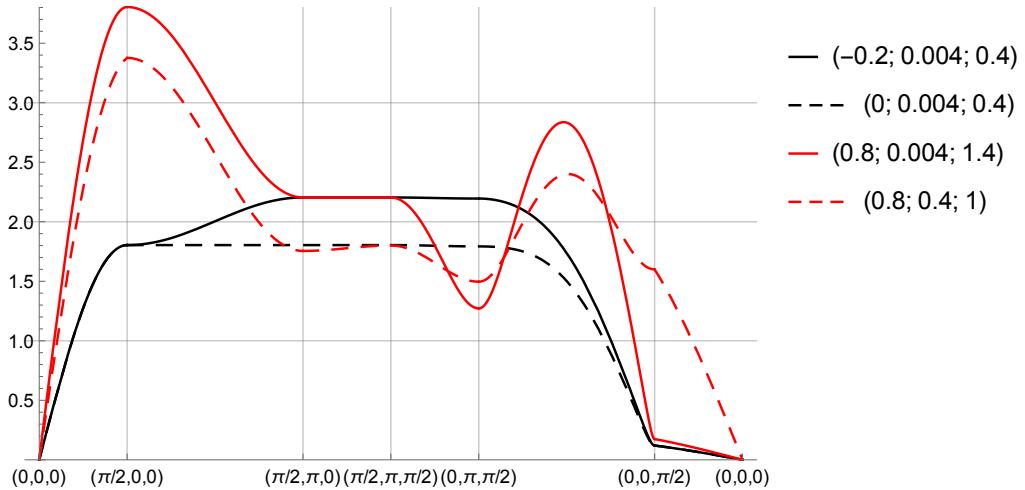
gde su $\widetilde{A_{3k}} = A_{3k}/2\sigma$ i $\widetilde{E_k} = E_k/2\sigma$. Koristeći već ranije navedene parametre možemo nacrtati

Slika 3.3: Magnetizacija na $T = 0$ K u zavisnosti od $\eta = 1 + \delta$ 

Slika 3.4: Nelova temperatura u zavisnosti od anizotropijskog parametra

grafik kritične temperature u zavisnosti od parametra anizotropije $\eta = 1 + \delta$ za različite modele (slika 3.4).

Za jedinjenje LaFeAsO je eksperimentalno utvrđena kritična temperatura od $T_N = 138K$, što odgovara anizotropijskom parametru $\delta = 6.2 \cdot 10^{-4}$ za model korišten ranije. To se bolje slaže sa očekivanim vrednostima anizotropije. Parametri anizotropije su obično par redova veličine manji nego koeficienti interakcije spinova na susednim čvorovima i njihova osnovna uloga se ogleda u pružanju preferiranog pravca magnetizacije. Za sva tri izbora koeficijenata interakcije vrednosti parametra anizotropije leže između 0 – 0.01. Sva tri modela zadovoljavaju

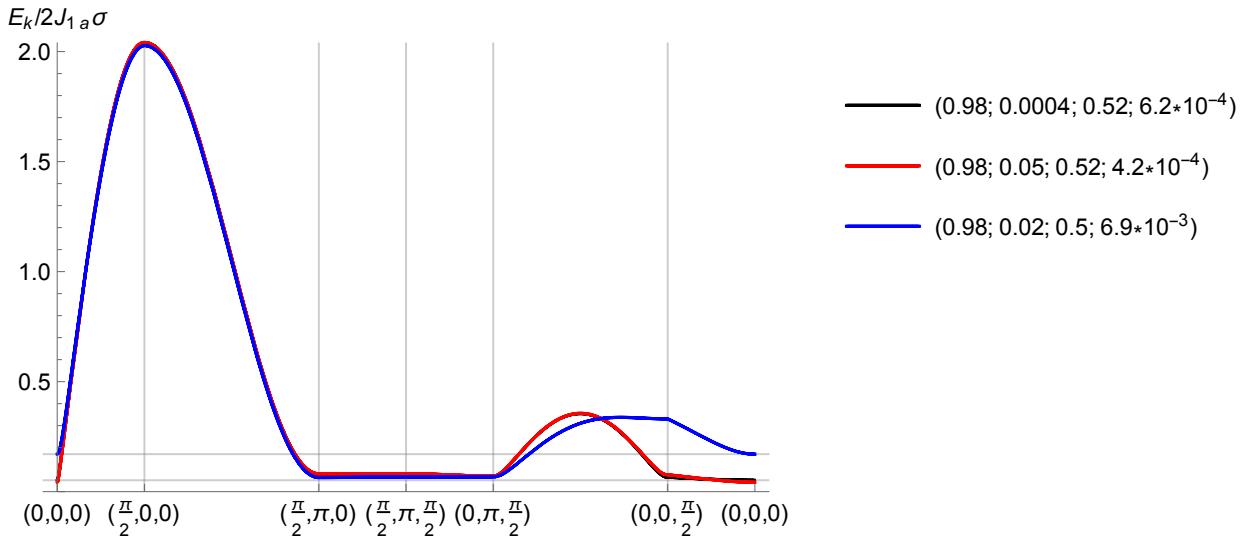


Slika 3.5: Energijski spektar za razne parametre interakcije u jedinicama J_{1a}

uslove ranije prepostavljene $J_{1a} \neq J_{1b}$, $J_{1c} \ll J_{1a}$, $J_{1a} \approx 2J_2$. Vodoravna linija predstavlja jednakost $T_N = 138$ K, pa iz njenog preseka sa graficima možemo naći vrednosti anizotropijskih koeficijenata.

Na slici 3.5 je prikazan energijski spektar duž određenih pravaca. Energiju smo definisali kao $E_k/2\sigma$. U legendi su napisani skupovi parametara koji odgovaraju datom grafiku u formi (J_{1b}, J_c, J_2) . Kako je parametar anizotropije $\delta = 0$ ne postoji ni gep kao što je prikazano na grafiku. Modeli sa pozitivnim i visokim vrednostima za J_{1b} imaju pikove u tački $(\pi/2, 0, 0)$ i u tački na pravcu $y \in \{\pi, 0\}$ za konstantne $x = 0$ i $z = \pi/2$. Takođe imaju minimum u $(0, \pi, \pi/2)$. Za razliku od ova dva modela ostali modeli ne pokazuju tako "živo" ponašanje. Prva dva modela imaju platoe, delove u kojima imaju konstantne vrednosti energije, u velikom broju pravaca. Poslednji model $(0.8; 0.4; 1)$ ima mnogo višu vrednost od ostalih u tački $(0, 0, \pi/2)$, što je i očekivano pošto je njegova vrednost J_c parametra viša nego kod ostalih.

Na slici 3.6 je prikazan energijski spektar jedinjenja LaFeAsO, odnosno modela koji bi mogli da dobro opišu ovo jedinjenje. Lako su uočljivi gepovi koji potiču od činjenice da je za ovo jedinjenje $\delta = \eta - 1 \neq 0$. Vidimo da je gep za model sa $J_c = 1$ meV viši od ostalih i to se dešava zbog toga što je za ovaj model parametar spinske anizotropije dosta viši. Iz istog razloga i dolazi do razlike ova tri modela u zadnjem segmentu $((0, 0, \pi/2) \rightarrow (0, 0, 0))$. Primetimo još da je u slučaju trećeg modela energija spin gepa viša od energija u oblastima sa konstantnim $y = \pi$.



Slika 3.6: Energijski spektar za LaFeAsO

Sada ćemo naći energijski gep za spinski spektar. To dobijamo kada pustimo da $\vec{k} \rightarrow 0$.

Izraz za energijski gep je oblika:

$$\Delta_{0,0,0} = 2\sigma \sqrt{(J_{1b} - \eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2))^2 - (J_{1a} + J_{1c} + J_2)^2} \quad (3.16)$$

Vrednost gepa u tački $(0, 0, 0)$ za podatke koje smo već navodili iznosi $\Delta = 5.1801$ meV, dok u tački (π, π, π) $\Delta = 7.07259$ meV. Ovo se slaže sa rezultatima [7] ($\Delta = 6.5$ meV)

3.2 Trodimenzioni hamiltonijan sa jednojonskom anizotropijom

Kao finalni korak pri formulisanju modela za grupu železnih pniktida dodaćemo član jednojonske anizotropije ili kako se još naziva magneto-kristalografska anizotropija. Ona se predstavlja dodatnim članom u hamiltonijanu oblika:

$$\hat{H}' = -D \sum_n [(\hat{S}_n^z(A))^2 + (\hat{S}_n^z(B))^2] \quad (3.17)$$

Pri rešavanju ovog modela metodom Grinovih funkcija pojavljuju se komutatori oblika:

$$[\hat{S}_n^\pm, (\hat{S}_m^z)^2] = \pm(\hat{S}_m^\pm \hat{S}_m^z + \hat{S}_m^z \hat{S}_m^\pm) \quad (3.18)$$

Sada predstavlja problem kako ovo dekuplovati jer se pojavljuju Grinove funkcije oblika: $\langle\langle(\hat{S}_m^\pm \hat{S}_m^z + \hat{S}_m^z \hat{S}_m^\pm)|\hat{S}_l^-\rangle\rangle$. U ovoj Grinovoj funkciji imamo operatore \hat{S}^\pm i \hat{S}^z na istom čvoru, što nas sprečava da iskoristimo uobičajeno Tjablikovsko dekuplovanje. Zato se pribegava drugim načinima dekuplovanja. Ovde ćemo prikazati dva: Anderson-Kalen dekuplovanje i RPA aproksimacija Devlinovog tipa. Pored ova dva načina postoje još i Naratov [18] i način Lajnsa [19]. Ova dva poslednja su oblika:

$$\begin{aligned} \text{Narath} \quad & \langle\langle(\hat{S}_m^\pm \hat{S}_m^z + \hat{S}_m^z \hat{S}_m^\pm)|\hat{S}_l^-\rangle\rangle \approx 2\langle\hat{S}_m^z\rangle\langle\langle\hat{S}_m^\pm|\hat{S}_l^-\rangle\rangle \\ \text{Lines} \quad & \langle\langle(\hat{S}_m^\pm \hat{S}_m^z + \hat{S}_m^z \hat{S}_m^\pm)|\hat{S}_l^-\rangle\rangle \approx \frac{\langle 3(\hat{S}_m^z)^2 - S(S+1) \rangle}{\langle\hat{S}_m^z\rangle}\langle\langle\hat{S}_m^\pm|\hat{S}_l^-\rangle\rangle \end{aligned}$$

Naratov način predstavlja ustvari aproksimaciju srednjeg polja, pošto njegova šema dekuplovanja odgovara zameni $\langle(hat{S}^z)^2\rangle$ izrazom $2\hat{S}^z\langle\hat{S}^z\rangle$ i važi za $D \ll k_B T_N$.

Lajnov tip dekuplovanja važi za male vrednosti parametra anizotropije i u slučaju niskih temperatura se dobro slaže sa Anderson-Kalen dekuplovanjem. Takođe, za razliku od Anderson-Kalen i Naratovog dekuplovanja ovde ne važi jednakost $\langle(\hat{S}^z)^2\rangle = \frac{1}{3}S(S+1)$. Lajnov način dekuplovanja se najbolje slaže i sa Devlinovim metodom, pogotovo u limitu niskih temperatura.

3.2.1 Anderson-Kalen dekuplovanje

U ovom slučaju prethodni problem rešavamo dekuplovanjem [11]:

$$\langle\langle(\hat{S}_m^\pm\hat{S}_m^z + \hat{S}_m^z\hat{S}_m^\pm)|\hat{S}_l^-\rangle\rangle \approx 2\sigma\theta_n^z\langle\langle\hat{S}_n^\pm|\hat{S}_l^-\rangle\rangle \quad (3.19)$$

Ovdje koristimo oznake $\sigma = \langle\hat{S}^z\rangle$, a funkcija θ_n^z je oblika:

$$\theta_n^z = 1 - \frac{1}{2S^2}[S(S+1) - \langle(\hat{S}^z)^2\rangle] \quad (3.20)$$

Iz uslova $S(S+1) = (\hat{S}^x)^2 + (\hat{S}^y)^2 + (\hat{S}^z)^2$ možemo dobiti korisnu jednakost (koristeći operatore \hat{S}^\pm , definisane sa $\hat{S}^\pm = \hat{S}^x \pm i\hat{S}^y$):

$$\langle(\hat{S}^z)^2\rangle = S(S+1) - \langle\hat{S}^z\rangle - \langle\hat{S}^-\hat{S}^+\rangle$$

Odavde korelacionu funkciju $\langle\hat{S}^-\hat{S}^+\rangle$ izrazimo kao $\langle\hat{S}^-\hat{S}^+\rangle = \sigma\Phi$. Uzimajući u obzir da je $\sigma = \langle\hat{S}^z\rangle$ i $S = 1$, dobijamo kao konačan izraz za θ :

$$\theta = 1 - \frac{1}{2}(1 + \Phi)\sigma \quad (3.21)$$

Sada kada znamo oblik konstante dekuplovanja možemo preći na definisanje Grinovih funkcija. Koristimo iste Grinove funkcije kao i prethodnim delovima: $\langle\langle\hat{S}_n^+(A)|\hat{S}_l^-(A)\rangle\rangle = G_1(k, E)$ i $\langle\langle\hat{S}_n^-(B)|\hat{S}_l^-(A)\rangle\rangle = G_2(k, E)$. Kako se hamiltonijan nije drastično promenio, tj. ostao je isti uz dodatak jednog člana, sistem jednačina za Grinove funkcije je oblika:

$$(E - A_{3k})G_1(k, E) - B_{3k}G_2(k, E) = \frac{i}{2\pi}2\sigma \quad (3.22a)$$

$$B_{3k}G_1(k, E) + (E + A_{3k})G_2(k, E) = 0 \quad (3.22b)$$

Ove jednačine su identične sa onim iz prethodnih poglavlja, ali sa drugačijim parametrima A_{3k} i B_{3k} :

$$A_{3k} = 2\sigma(\eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2) + J_{1b} \cos k_y + D\theta) \quad (3.23)$$

$$B_{3k} = 2\sigma(J_{1a} \cos k_x + J_{1c} \cos k_z + 2J_2 \cos k_y \cos k_x) \quad (3.24)$$

Iz jednačina (3.22) možemo dobiti izraz za energiju spinskih pobuđenja:

$$E_k = \sqrt{A_{3k}^2 - B_{3k}^2}$$

Izraz za magnetizaciju je oblika:

$$\sigma = \frac{1 + 2\Phi}{1 + 3\Phi + 3\Phi^2} \quad (3.25)$$

gde je Φ :

$$\Phi = \frac{\langle \hat{S}^- \hat{S}^+ \rangle}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_k \left(\frac{A_{3k}}{E_k} \coth \frac{E_k}{2k_B T} - 1 \right)$$

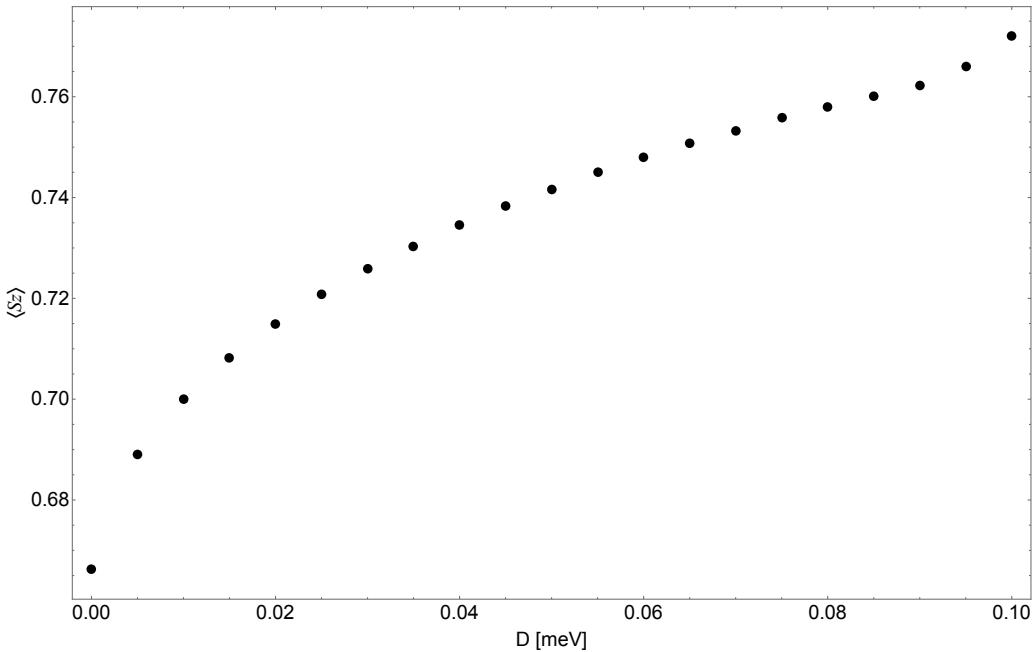
Za magnetizaciju na nula Kelvina dobijamo jednostavno:

$$\sigma_0 = \frac{1 + 2\Phi_0}{1 + 3\Phi_0 + 3\Phi_0^2}$$

a za Φ_0 uzimamo limes kada $T \rightarrow 0$ od Φ :

$$\Phi_0 = \frac{1}{N} \sum_k \left(\frac{A_{3k}}{E_k} - 1 \right)$$

Zbog postojanja funkcije θ jednačina za magnetizaciju na nula Kelvina postaje samosaglasna jer i Φ takođe zavisi od magnetizacije. Rešavanjem ovog sistema jednačina (za Φ_0 i za σ_0) dobijamo magnetizaciju na apsolutnoj nuli u zavisnosti od parametra anizotropije D . Grafik ove zavisnosti je prikazan na slici 3.8 (D je u jedinicama meV). Kao što vidimo sa slike magnetizacija je rastuća funkcija parametra anizotropije D . Za ostale vrednosti interakcijskih parametara smo uzimali vrednosti iz [7]. Uz to smo za vrednost spinske anizotropije uzeli $\eta = 1$.



Slika 3.7: Magnetizacija na $0K$ u zavisnosti od anizotropijskog parametra $D = J_s$

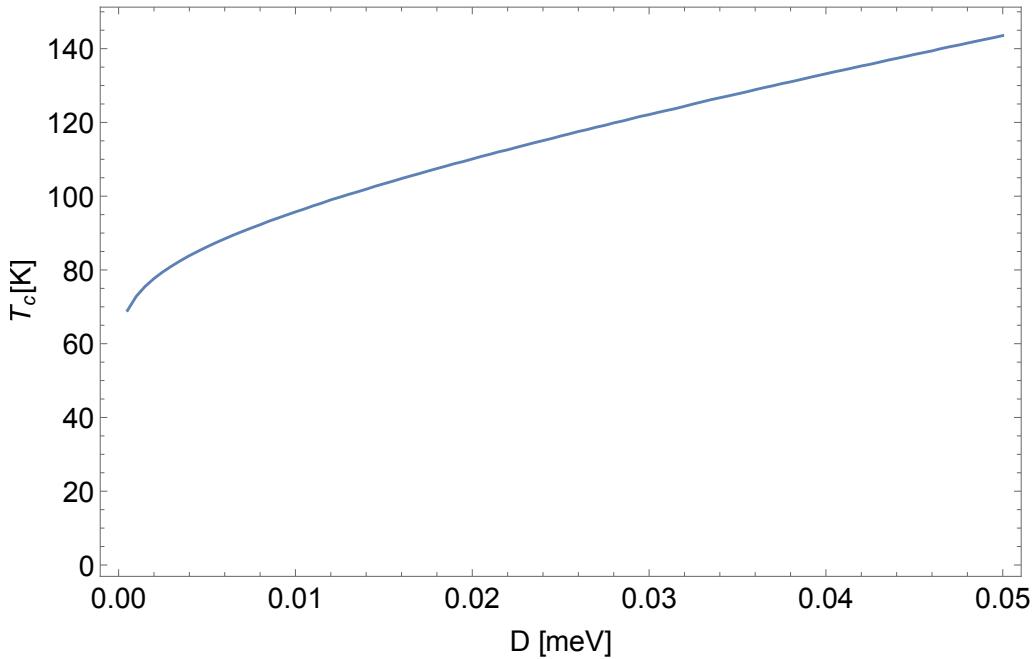
Zbog ove samosaglasnosti u jednačinama teško je odrediti i ostale relevantne veličine, kao što je kritična temperatura. Pri temperaturama bliskim kritičnoj magnetizacija pada na vrlo malu vrednost što daje mogućnost da se kotangens u okviru Φ razvije u red. Kada bismo prosto pustili limes $\sigma \rightarrow 0$, pri traženju $\lim_{T \rightarrow T_N} \theta$ dobili bismo $\theta = 1$, što bi kasnije u izračunavanju temperature vodilo ka nefizičkim vrednostima kritične temperature (bile bi negativne). Tako da trebamo Φ razviti u red i tada dobijamo za θ :

$$\theta_{T \rightarrow T_N} \approx 1 - \frac{1}{2N} k_b T \sum_k \frac{\tilde{A}_{3k}}{\tilde{E}_k^2}$$

gde su $\tilde{A}_{3k} = A_{3k}/2\sigma$ i $\tilde{E}_k = E_k/2\sigma$. Uvezši sve ovo u obzir, izraz za Nelovu temperaturu je oblika:

$$T_N = \frac{2}{3k_B} \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_k \frac{\tilde{A}_{3k}}{\tilde{E}_k^2}} \quad (3.26)$$

Kao što vidimo i ova je jednačina samosaglasna i treba se rešavati zajedno sa θ_{T_N} . Rezultati numeričke analize su prikazani slici 3.8. Ovo još jednom potvrđuje pozitivnu ulogu jednojonske anizotropije pri uspostavljanju uređene strukture, Nelova temperatura raste pri porastu anizotropijskog parametra D . Već smo napomenuli da za ove eksperimentalne po-



Slika 3.8: Kritična temperatura u zavisnosti od anizotropijskog parametra D

datke interakcijskih parametara odgovara Nelova temperatura od 138 K. Na ovom grafiku možemo pročitati za koje D ovaj model dostiže Nelovu temperaturu od 138 K. Ta vrednost je $D = 0.0445 \text{ meV} = 0.00089 J_{1a}$.

Možemo dobiti izraz i za spin gep, tako što ćemo potražiti limes kada $\vec{k} \rightarrow 0$ u energiji. U slučaju da je vrednost spinske anizotropije nula, $\eta = 1$, dobijamo sledeći izraz:

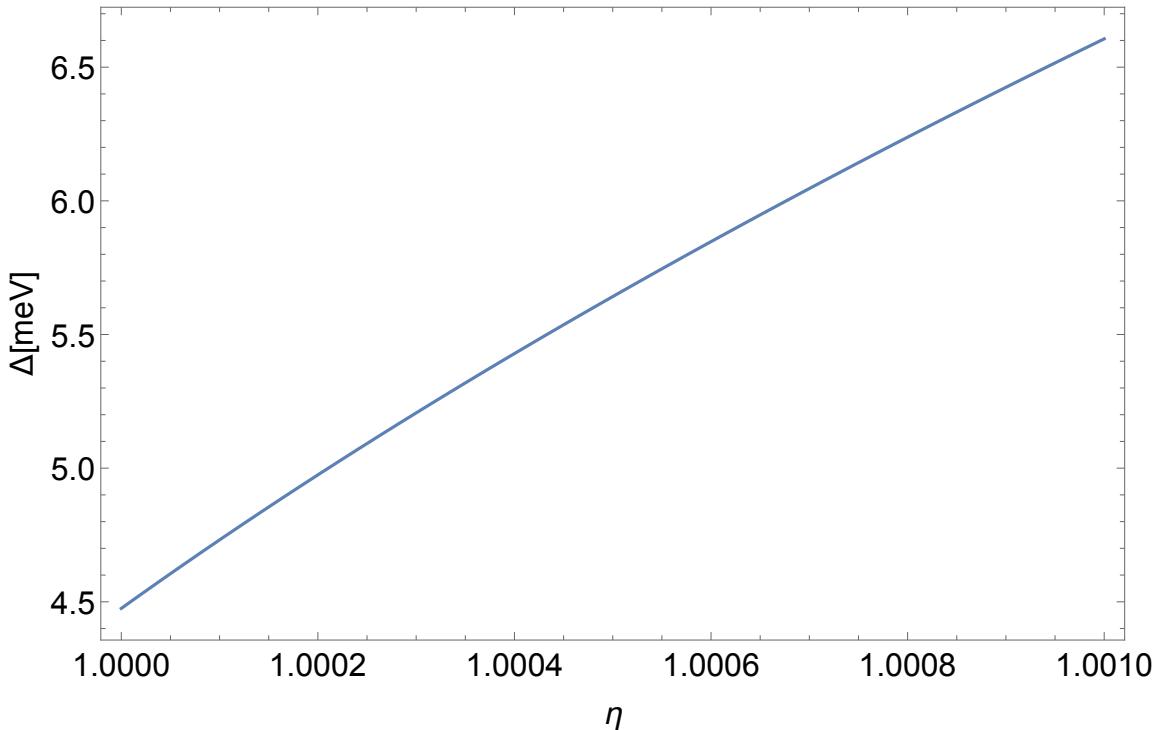
$$\Delta = 2\sigma\sqrt{D\theta(2J_{1b} + 4J_2 + 2J_{1c} + D\theta)}$$

Odavde za već korištene vrednosti parametara interakcije i uzimajući da je $D = 0.445J_{1a}$, za spin gep dobijamo vrednost $\Delta = 4.47 \text{ meV}$. U slučaju da je $\eta \neq 1$, za gep dobijamo izraz:

$$\Delta = 2\sigma\sqrt{(J_{1b} + \eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2) + D\theta)^2 - (J_{1a} + J_{1c} + 2J_2)^2}$$

Na slici 3.9 je prikazana zavisnost spin gepa od spinske anizotropije. Vidimo odmah da gep raste sa porastom spinske anizotropije.

Sada kada imamo vrednost za parametar jednojonske anizotropije možemo potražiti i zavisnost magnetizacije od temperature, što će dati i zavisnost spin gepa od temperature. Magnetizacija za ovaj set parametara je data na slici 3.10. Uočavamo da magnetizacija pada kako

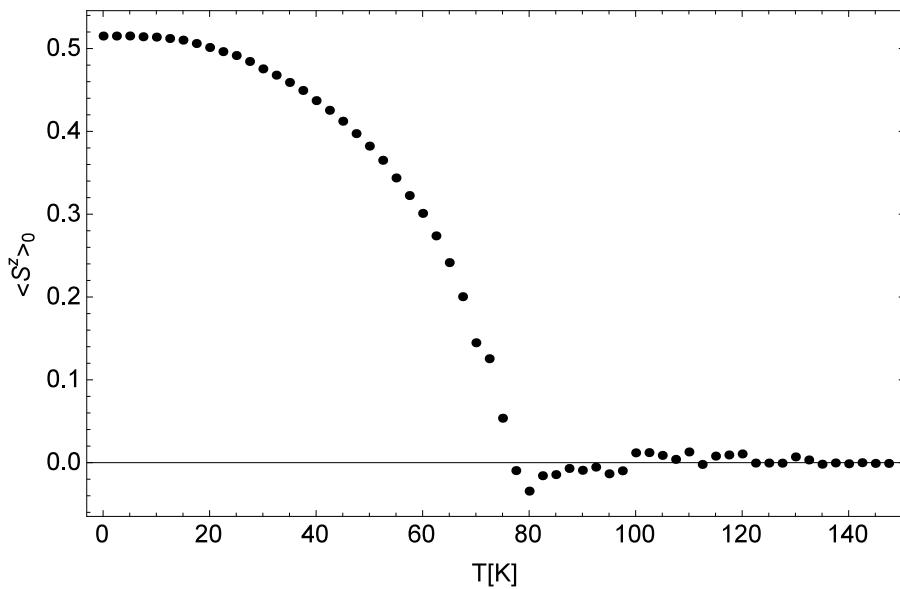


Slika 3.9: Vrednost spin gepa u zavisnosti od parametra anizotropije η

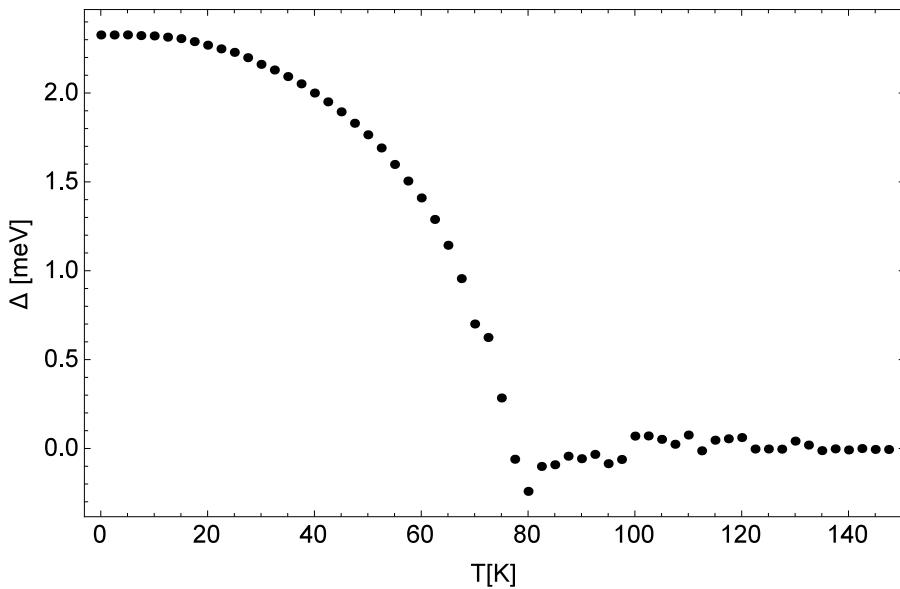
temperatura raste što je i za očekivati. Postoje i negativni rezultati na grafiku, ali to je posledica lošeg numeričkog rešavanja samosaglasne jednačine (3.19). Iako postoje odstupanja ona su dovoljno mala da ih možemo prihvati kao grešku računa, a ne istinsko anomalno ponašanje sistema na tim temperaturama. Rezultati dobijeni direktnim računanjem magnetizacije na apsolutnoj nuli i Nelove temperature se ne poklapaju sa vrednostima koje se mogu pročitati sa grafika 3.10. Vrednosti ovih veličina na grafiku su niže, magnetizacija oko 0.5 a Nelova temperatura oko 80 K.

Sada možemo odrediti i temperatursku zavisnost spin gepa. To je prikazano na slici 3.11. Kako je magnetizacija opadajuća funkcija temperature tako i spin gep se mora povinovati istom pravilu. Kao i kod magnetizacije, razlog pojavljivanja negativnih vrednosti leži u numeričkom rešavanju jednačina.

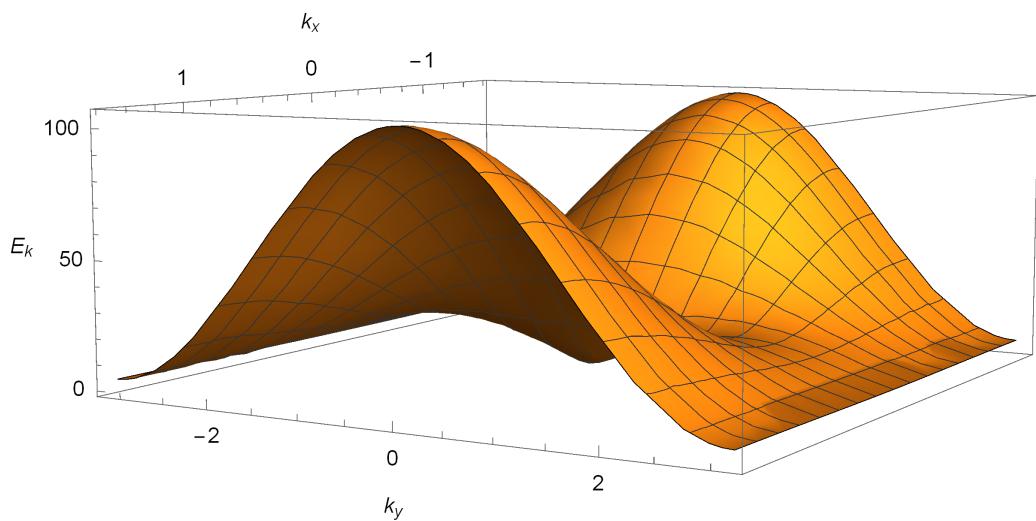
Pored spin-gepa i magnetizacije, energija sistema takođe zavisi od temperature. Na slici 3.12 je prikazana disperzija sistema na apsolutnoj nuli sa vrednostima magnetizacije i Φ uzetih sa grafika 3.11. Vidimo da spektar energija izgleda skoro identično spektru prikazanom na slici 3.6. Vrednosti energija u istim tačkama su gotovo jednake, i na jednoj i na drugoj tački $(\pi/2, 0, 0)$ grafik ima maksimum koji iznosi oko $(200 \cdot \sigma)$ meV-a.



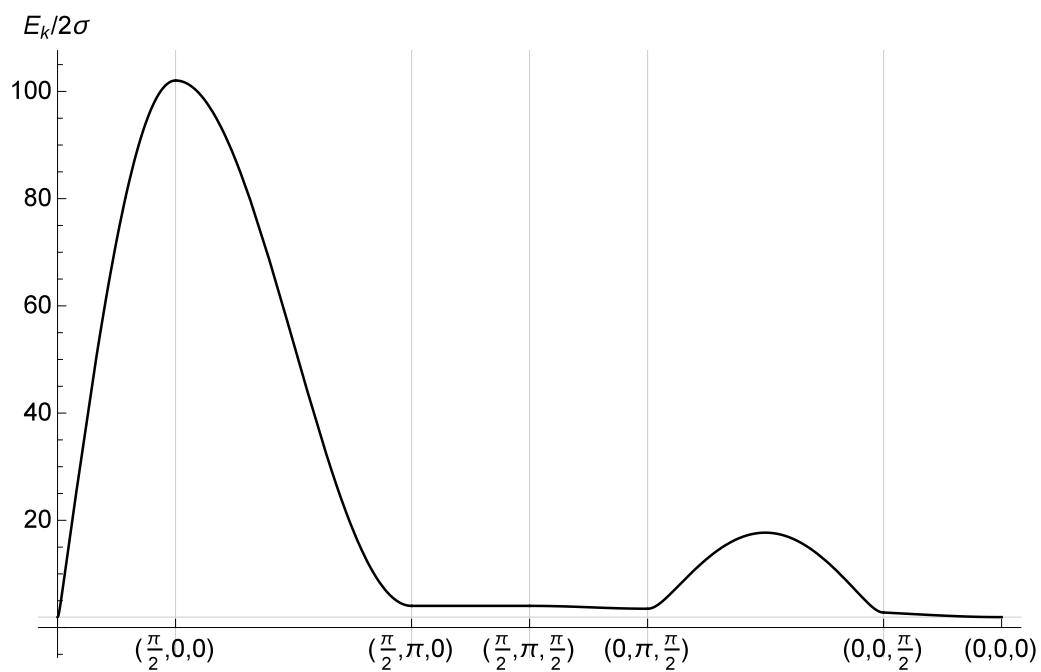
Slika 3.10: Magnetizacija u zavisnosti od temperature



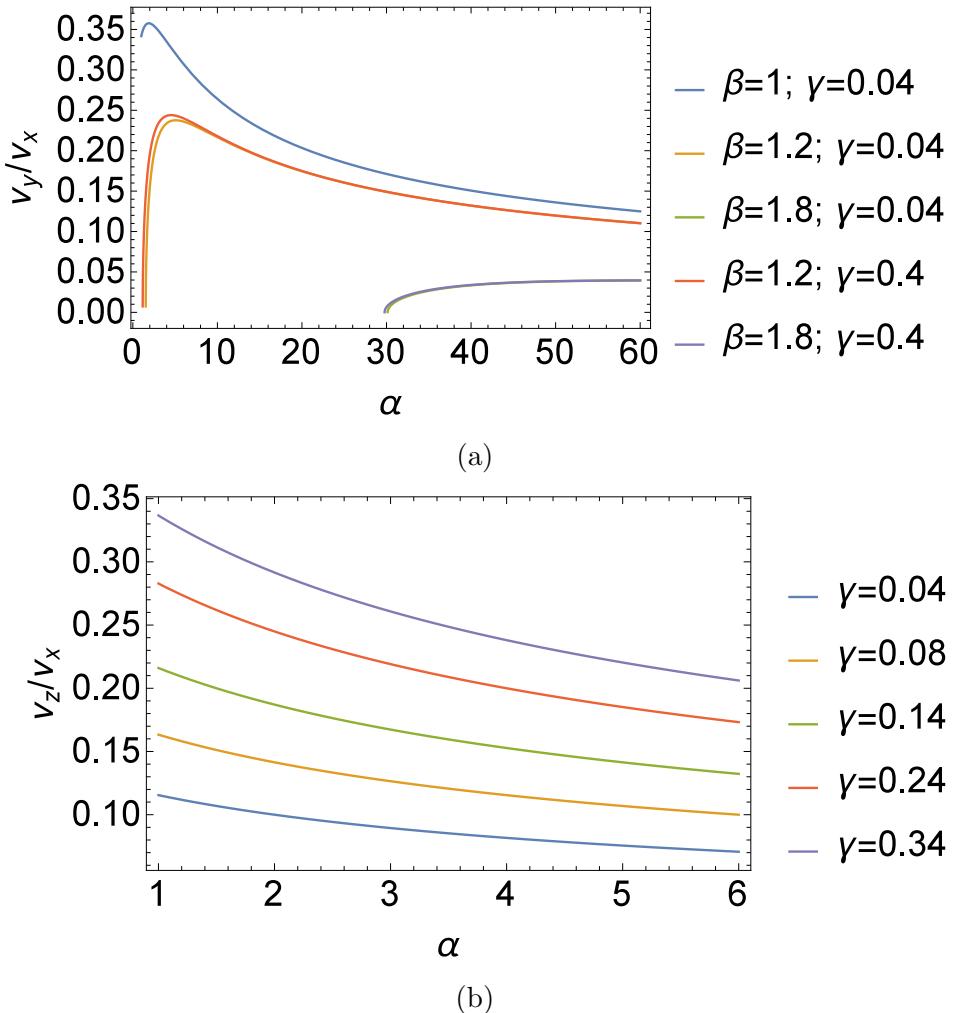
Slika 3.11: Vrednost spin gepa u zavisnosti od temperature



Slika 3.12: Energijska disperzija sistema sa parametrima interakcije [7] i $D = 0.0445$ na 0 K



Slika 3.13: Spektar energija sistema [7] za određene pravce na 0 K



Slika 3.14: (a) Odnosi brzina v_y/v_x za različite parametre interakcije. (b) Odnosi brzina v_z/v_x za različite vrednosti γ

Na slici 3.14 jasno se vidi energijski gep veličine $\Delta \approx 3eV$.

Izrazi za odnose brzina spinskih talasa imaju isti oblik kao u prethodnom delu sa spin-skom anizotropijom (jednačine (3.7)) sa dodatkom jednojonskog anizotropijskog člana. Zbog pojavljivanja člana jednojonske anizotropije je nemoguće skalirati, baš kao i energiju, brzinu sa magnetizacijom, tako da ona definitivno ostaje zavisna od temperature. Sa slike 3.15a vidimo da dodatni član od jednojonske anizotropije nema nikakvu ulogu u kreiranju odnosa brzina, te je grafik gotovo identičan onom sa slike 3.2. Grafik sa slike b) i jeste identičan sa grafikom 3.2b zbog istih oblika zavisnosti.

3.2.2 Devlinov metod dekuplovanja

Kao što smo već rekli postojanje anizotropijskog člana u hamiltonijanu nas onemogućava da se zadržimo samo na RPA aproksimaciji, pošto dobijamo članove koji opisuju koralaciju između $S^{x,y}$ i S^z na istom čvoru što se ne može nikako zanemariti. U radu [10] Devlin je predložio da ovu kombinaciju operatora predstavimo novim operatorom \hat{A}^2 .

Ovom procedurom, očigledno, dobijamo nove Grinove funkcije. Daljim sprovođenjem ove metode, za svaku novo-generisanu Grinovu funkciju, videćemo da nakon $2S$ jednačina zatvaramo sistem. Ovim, naravno, dobijamo $2S$ jednačina sa $2S$ nepoznatih, te nisu ni potrebni novi metodi dekuplovanja viših Grinovih funkcija, tj. možemo se zadržati na već proverenom RPA dekuplovanju što je i bila početna motivacija.

Definišimo nove operatore kao:

$$\hat{A}_n^1 = \hat{S}_n^+, \quad \hat{A}_n^2 = \hat{A}_n^1 \hat{S}_n^z + \hat{S}_n^z \hat{A}_n^1 \quad (3.27a)$$

$$\hat{A}_n^i = -[\hat{A}_n^{i-1}, (\hat{S}_n^z)^2] \quad \text{za } 2S \geq i \geq 2 \quad (3.27b)$$

$$\hat{B}_n^i = [\hat{A}_n^i, \hat{S}_n^+] \quad (3.27c)$$

$$\hat{C}_n^i = [\hat{A}_n^i, \hat{S}_n^-] \quad (3.27d)$$

\hat{C}_n^i predstavlja polinom argumenta \hat{S}_n^z reda i i to takav da poseduje samo parne stepene ukoliko je i parno, a samo neparne ukoliko je i neparno.

Može se pokazati da, za svako i , važi:

$$[\hat{A}_n^i, \hat{S}_n^z] = -\hat{A}_n^i \quad (3.28)$$

To ćemo dokazati primenom matematičke indukcije.

I Pokažimo da važi za $i = 1$ $\hat{A}_n^1 = \hat{S}_n^+$:

$$[\hat{S}_n^+, \hat{S}_n^z] = -S_n^+$$

II Prepostavimo da važi za $i - 1$:

$$[\hat{A}_n^{i-1}, \hat{S}_n^z] = -\hat{A}_n^{i-1}$$

III Sada ćemo pokazati da u tom slučaju važi i za i :

$$\begin{aligned} [\hat{A}_n^i, \hat{S}_n^z] &= [[\hat{A}_n^{i-1}, (\hat{S}_n^z)^2], \hat{S}_n^z] = [\hat{A}_n^{i-1}, \hat{S}_n^z](\hat{S}_n^z)^2 - (S_n^z)^2[\hat{A}_n^{i-1}, \hat{S}_n^z] = \\ &- \hat{A}_n^{i-1}(\hat{S}_n^z)^2 + (S_n^z)^2\hat{A}_n^{i-1} = -\hat{A}_n^i \end{aligned}$$

Dalje možemo pokazati da važi:

$$\hat{A}_n^i = (2\hat{S}_n^z - 1)\hat{A}_n^{i-1} \quad (3.29)$$

Kako je $-\hat{A}_n^{i-1} = \hat{A}^{i-1}\hat{S}_n^z - \hat{S}_n^z\hat{A}_n^{i-1}$ ovo jednostavno saberemo sa $2\hat{S}_n^z\hat{A}_n^{i-1}$ i dobićemo izraz iz definicije za operator \hat{A}_n^i . Dalje, pošto je operator \hat{S}_n^z dijagonalan i svi njegovi stepeni takođe dijagonalni operatori vidimo da je za svako $i > 2S$ operator \hat{A}_n^i linearna kombinacija svih nižih operatora \hat{A} , odnosno:

$$\hat{A}_n^{2S+1} = \sum_{j=1}^{2S} a_j \hat{A}_n^j \quad (3.30)$$

Ovde je korisno dokazati da za spin $S = 1$ važi $\hat{A}^3 = \hat{A}^1$. Raspišimo kako izgleda operator \hat{A}^3 pomoću jednakosti $\hat{A}_n^i = (2\hat{S}_n^z - 1)\hat{A}_n^{i-1}$. Znači:

$$\hat{A}_n^3 = (2\hat{S}_n^z - 1)^2\hat{A}_n^1 = (4\hat{S}_n^z(\hat{S}_n^z - 1) + 1)\hat{A}_n^1$$

Podsetimo se sada jednakosti: $\prod_{N=-S}^S (\hat{S}_n^z - N) = 0$. Za $S = 1$, ovo postaje $\hat{S}_n^z(\hat{S}_n^z - 1)(\hat{S}_n^z + 1) = 0$. Odavde jasno sledi da je:

$$\hat{S}_n^z(\hat{S}_n^z - 1) = 0$$

tako da važi $\hat{A}_n^3 = \hat{A}_n^1$.

Zadnje napomene se tiču načina dekuplovanja viših Grinovih funkcija. Iskorištena je analo-

gija sa klasičnom **RPA** aproksimacijom. Na primer, Grinovu funkciju $\langle\langle \hat{A}_n^i \hat{S}_m^z | \hat{S}_l^- \rangle\rangle$ dekupljemo:

$$\langle\langle \hat{A}_n^i \hat{S}_m^z | \hat{S}_l^- \rangle\rangle \approx \langle \hat{S}_m^z \rangle \langle\langle \hat{A}_n^i | \hat{S}_l^- \rangle\rangle$$

jer je operator \hat{A}_n^i neka kombinacija \hat{S}_n^+ ili \hat{S}_n^- operatora. Dalje, Grinove funkcije $\langle\langle \hat{B}_n^i \hat{S}_m^z | \hat{S}_l^- \rangle\rangle$ i $\langle\langle \hat{C}_n^i \hat{S}_m^z | \hat{S}_l^- \rangle\rangle$ dekuplujemo, u skladu sa [10], na sledeći način:

$$\langle\langle \hat{B}_n^i \hat{S}_m^- | \hat{S}_l^- \rangle\rangle \approx 0$$

$$\langle\langle \hat{C}_n^i \hat{S}_m^+ | \hat{S}_l^- \rangle\rangle \approx \langle \hat{C}_n^i \rangle \langle\langle \hat{S}_m^z | \hat{S}_l^- \rangle\rangle$$

Operator \hat{B}_n^i je neka funkcija \hat{S}_n^\pm operatora i takvi doprinosi se zanemaruju u RPA aproksimaciji. S druge strane, već smo rekli da je operator \hat{C}_n^i neki polinom argumenta \hat{S}_n^z tako da on ima sličan model dekuplovanja kao i \hat{S}_n^z .

Hamiltonijan $S = 1$ sistema u kolinearnoj fazi sa jednojonskom anizotropijom je oblika:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & J_{1a} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1x}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^-(B) + \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1x}}^z(B) \right] + \\ & + \frac{J_{1b}}{2} \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_{1y}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^+(A) + \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^-(A) \right) + \eta \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_{1y}}^z(A) + (A \rightarrow B) \right] + \\ & + J_c \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_c} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_c}^-(B) + \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_c}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_c}^z(B) \right] + \\ & + J_2 \sum_{\vec{n}, \vec{\lambda}_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^-(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^-(B) + \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^+(B) \right) - \eta \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{\vec{n} + \vec{\lambda}_2}^z(B) \right] - \\ & - D \sum_{\vec{n}} [(\hat{S}_n^z(A))^2 + (\hat{S}_n^z(B))^2] \end{aligned} \tag{3.31}$$

Tražimo Grinove funkcije za sledeće operatore: $\hat{S}_n^+(A)$, $\hat{S}_n^-(B)$, $\hat{A}_n^{2+}(A)$ i $\hat{A}_n^{2-}(B)$. Važi sledeći

set komutacionih relacija (analogno za B podrešetku):

$$\begin{aligned} [\hat{S}_n^\pm(A), (\hat{S}_n^z(A))^2] &= \mp \hat{A}_n^{2\pm}(A) \\ [\hat{A}_n^{2\pm}(A), (\hat{S}_n^z(A))^2] &= \mp \hat{A}_n^{3\pm}(A) = -\hat{S}_n^+(A) \\ [\hat{A}_n^{2\pm}, \hat{S}_n^z] &= \mp \hat{A}_n^{2\pm} \\ [\hat{A}_n^{2\pm}, \hat{S}_n^\mp] &= 2\hat{Q}_n \quad \text{gde je} \quad \hat{Q}_n = 3(\hat{S}_n^z)^2 - 2 \\ [\hat{A}_n^{2\pm}, \hat{S}_n^\pm] &= \pm 2(\hat{S}_n^\pm)^2 \end{aligned}$$

Sada kada znamo sve komutacione relacije možemo uraditi jednačine kretanja za ove Grinove funkcije. One imaju oblik (uzimamo da je $\hbar = 1$):

$$\begin{aligned} i \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{S}_n^+(A) | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle &= i\delta(t) \langle[\hat{S}_n^+(A), \hat{S}_l^-(A)]\rangle + \langle\langle [\hat{S}_n^+(A), \hat{H}] | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle \\ i \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{S}_n^-(B) | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle &= i\delta(t) \langle[\hat{S}_n^-(B), \hat{S}_l^-(A)]\rangle + \langle\langle [\hat{S}_n^-(B), \hat{H}] | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle \\ i \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{A}_n^{2+}(A) | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle &= i\delta(t) \langle[\hat{A}_n^{2+}(A), \hat{S}_l^-(A)]\rangle + \langle\langle [\hat{A}_n^{2+}(A), \hat{H}] | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle \\ i \frac{d}{dt} \langle\langle \hat{A}_n^{2-}(B) | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle &= i\delta(t) \langle[\hat{A}_n^{2-}(B), \hat{S}_l^-(A)]\rangle + \langle\langle [\hat{A}_n^{2-}(B), \hat{H}] | \hat{S}_l^-(A) \rangle\rangle \end{aligned} \tag{3.32}$$

Jednačine kretanja za odgovarajuće spinske operatore imaju sledeće oblike:

$$\begin{aligned} [\hat{S}_n^+(A), \hat{H}] &= J_{1a} \sum_{\lambda_{1a}} \{ \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^-(B) + \eta \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^z(B) \} + \\ &\quad + J_{1b} \sum_{\lambda_{1b}} \{ \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^+(A) - \eta \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^z(A) \} + \\ &\quad + J_{1c} \sum_{\lambda_{1c}} \{ \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^-(B) + \eta \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^z(B) \} + \\ &\quad + J_2 \sum_{\lambda_2} \{ \hat{S}_n^z(A) \hat{S}_{n+\lambda_2}^-(B) + \eta \hat{S}_n^+(A) \hat{S}_{n+\lambda_2}^z(B) \} + \\ &\quad + D \hat{A}_n^{2+}(A) \end{aligned} \tag{3.33}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{S}_n^-(B), \hat{H}] = & -J_{1a} \sum_{\lambda_{1a}} \{ \hat{S}_n^z(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^+(A) + \eta \hat{S}_n^-(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^z(A) \} - \\
& - J_{1b} \sum_{\lambda_{1b}} \{ \hat{S}_n^z(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^-(B) - \eta \hat{S}_n^-(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^z(B) \} - \\
& - J_{1c} \sum_{\lambda_{1c}} \{ \hat{S}_n^z(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^+(A) + \eta \hat{S}_n^-(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^z(A) \} - \\
& - J_2 \sum_{\lambda_2} \{ \hat{S}_n^z(B) \hat{S}_{n+\lambda_2}^+(A) + \eta \hat{S}_n^-(B) \hat{S}_{n+\lambda_2}^z(A) \} - \\
& - D \hat{A}_n^{2-}(B)
\end{aligned} \tag{3.34}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{A}_n^{2+}(A), \hat{H}] = & J_{1a} \sum_{\lambda_{1a}} \{ \hat{Q}_n(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^-(B) + \eta \hat{A}_n^{2+}(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^z(B) \} + \\
& + J_{1b} \sum_{\lambda_{1b}} \{ \hat{Q}_n(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^+(A) - \eta \hat{A}_n^{2+}(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^z(A) \} + \\
& + J_{1c} \sum_{\lambda_{1c}} \{ \hat{Q}_n(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^-(B) + \eta \hat{A}_n^{2+}(A) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^z(B) \} + \\
& + J_2 \sum_{\lambda_2} \{ \hat{Q}_n(A) \hat{S}_{n+\lambda_2}^-(B) + \eta \hat{A}_n^{2+}(A) \hat{S}_{n+\lambda_2}^z(B) \} + \\
& + D \hat{S}_n^+(A)
\end{aligned} \tag{3.35}$$

$$\begin{aligned}
[\hat{A}_n^{2-}(B), \hat{H}] = & -J_{1a} \sum_{\lambda_{1a}} \{ \hat{Q}_n(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^+(A) + \eta \hat{A}_n^{2-}(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1a}}^z(A) \} - \\
& - J_{1b} \sum_{\lambda_{1b}} \{ \hat{Q}_n(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^-(B) - \eta \hat{A}_n^{2-}(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1b}}^z(B) \} - \\
& - J_{1c} \sum_{\lambda_{1c}} \{ \hat{Q}_n(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^+(A) + \eta \hat{A}_n^{2-}(B) \hat{S}_{n+\lambda_{1c}}^z(A) \} - \\
& - J_2 \sum_{\lambda_2} \{ \hat{Q}_n(B) \hat{S}_{n+\lambda_2}^+(A) + \eta \hat{A}_n^{2-}(B) \hat{S}_{n+\lambda_2}^z(A) \} - \\
& - D \hat{S}_n^-(B)
\end{aligned} \tag{3.36}$$

Zamenom dobijenih komutatora u jednačine kretanja za Grinove funkcije dobijamo sistem jednačina sa višim Grinovim funkcijama. Dekuplovanje viših Grinovih funkcija vršimo na sledeći način:

$$\langle\langle \hat{Q}_n \hat{S}_m^\pm | \hat{S}_l^- \rangle\rangle_E \approx \langle Q_n \rangle \langle\langle \hat{S}_m^\pm | \hat{S}_l^- \rangle\rangle_E \tag{3.37}$$

$$\langle\langle \hat{A}_n^{2\pm} \hat{S}_m^z | \hat{S}_l^- \rangle\rangle_E \approx \langle \hat{S}_m^z \rangle \langle\langle \hat{A}_n^{2\pm} | \hat{S}_l^- \rangle\rangle_E \tag{3.38}$$

Ove četiri jednačine čine sistem jednačina iz koga možemo dobiti Grinove funkcije. U svrhu pregleđosti Grinove funkcije ćemo označavati sa $G_{1+}(k, E), G_{1-}(k, E), G_{2+}(k, E), G_{2-}(k, E)$, gde je očigledno koja oznaka pripada kojoj Grinovoj funkciji. Sistem jednačina za četiri nepoznate Grinove funkcije ima sledeći oblik:

$$(E - \mathcal{E}_{12})G_{1+}(k, E) - C_{12}G_{1-}(k, E) - DG_{2+}(k, E) = \frac{i}{2\pi}2\sigma \quad (3.39a)$$

$$(E + \mathcal{E}_{12})G_{1-}(k, E) + C_{12}G_{1+}(k, E) + DG_{2-}(k, E) = 0 \quad (3.39b)$$

$$(E - \mathcal{E}_{22})G_{2+}(k, E) - K_{12}G_{1+}(k, E) - K_{22}G_{1-}(k, E) = \frac{i}{2\pi}2\langle Q_n \rangle \quad (3.39c)$$

$$(E + \mathcal{E}_{22})G_{2-}(k, E) + K_{22}G_{1+}(k, E) + K_{12}G_{1-}(k, E) = 0 \quad (3.39d)$$

gde je:

$$\mathcal{E}_{12} = 2\sigma(\eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2) + J_{1b} \cos k_y)$$

$$C_{12} = 2\sigma(J_{1a} \cos k_x + J_{1c} \cos k_z + 2J_2 \cos k_x \cos k_y)$$

$$K_{12} = 2J_{1b}\langle Q \rangle \cos k_y + D$$

$$K_{22} = 2\langle Q \rangle(J_{1a} \cos k_x + J_{1c} \cos k_z + 2J_2 \cos k_x \cos k_y)$$

$$\mathcal{E}_{22} = 2\sigma\eta(J_{1a} - J_{1b} + J_{1c} + 2J_2)$$

$$\langle Q \rangle = 3\langle (\hat{S}^z)^2 \rangle - 2$$

$$\sigma = \langle \hat{S}^z \rangle$$

Energije elementarnih ekscitacija su polovi Grinovih funkcija. Primenom Kramerovog pravila na sistem (3.39) za energije spinskih pobuđenja dobijamo bikvadratnu jednačinu po E_k :

$$E_k^4 + B_k^2 E_k^2 - C_k^2 = 0 \quad (3.40)$$

gde su novi koeficijenti B_k i C_k dati izrazima:

$$B^2 = C_{12}^2 - \mathcal{E}_{22}^2 - \mathcal{E}_{12}^2 - 2DK_{12}$$

$$C^2 = C_{12}^2\mathcal{E}_{22}^2 - \mathcal{E}_{22}^2\mathcal{E}_{12}^2 + 2D\mathcal{E}_{22}\mathcal{E}_{12}K_{12} - D^2(K_{12}^2 + K_{22}^2) - 2C_{12}D\mathcal{E}_{22}K_{22}$$

a energija:

$$E_k = \begin{cases} \frac{B\sqrt{-1-\sqrt{B^2+(\frac{2C}{B})^2}}}{\sqrt{2}}, \\ \frac{B\sqrt{-1+\sqrt{B^2+(\frac{2C}{B})^2}}}{\sqrt{2}} \end{cases}$$

Konačno, eksplicitan izraz za Grinovu funkciju $G_{1+}(k, E_k)$ glasi:

$$G_{1+}(k, E) = \frac{\Delta_{G_{1+}}(E)}{(E - E_1)(E + E_1)(E - E_2)(E + E_2)} \quad (3.41)$$

gde je $\Delta_{G_{1+}}$ determinanta matrice:

$$\begin{pmatrix} \frac{i}{2\pi}2\sigma & -C_{12} & -D & 0 \\ 0 & E + \mathcal{E}_{12} & 0 & D \\ \frac{i}{2\pi}2\langle Q \rangle & -K_{22} & E - \mathcal{E}_{22} & 0 \\ 0 & K_{12} & 0 & E + \mathcal{E}_{22} \end{pmatrix}$$

i ona iznosi:

$$\Delta_{G_{1+}}(E) = \frac{i}{2\pi}2(\mathcal{E}_{12}E + E^2 + \mathcal{E}_{22}(E + \mathcal{E}_{12}) - DK_{12})(D\langle Q \rangle + \sigma(E - \mathcal{E}_{22})) \quad (3.42)$$

Ovaj izraz za Grinovu funkciju može se svesti na:

$$G_{1+}(k, E) = \frac{i}{2\pi} \sum_{j=1}^4 \frac{P(E_j)}{E - E_j} \quad (3.43)$$

gde je:

$$P(E_j) = \frac{\Delta_{G_{1+}}(E_j)}{\prod_{i \neq j} (E_j - E_i)}$$

Pomoću ove funkcije se pojednostavljuje i zapis korelaceone funkcije:

$$\langle \hat{S}_n^-(A) \hat{S}_n^+(A) \rangle = \frac{1}{N} \sum_k \sum_i^4 \frac{P(E_i)}{e^{E_i/\theta} - 1}, \quad \theta = k_B T \quad (3.44)$$

Ovaj izraz se može i dalje uprostiti tako da je oblik korelace funkcije sličan izrazima iz prošlih glava:

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}_n^-(A) \hat{S}_n^+(A) \rangle &= \frac{1}{N} \sum_k \left\{ \frac{P(E_1) - P(-E_1)}{2} \coth(E_1/2\theta) + \frac{P(E_2) - P(-E_2)}{2} \coth(E_2/2\theta) + \right. \\ &\quad \left. + \frac{P(E_1) + P(E_2) - 3(P(-E_1) + P(-E_2))}{2} \right\} \end{aligned} \quad (3.45)$$

$\langle Q \rangle$ smo dobili kao vrednost komutatora $[\hat{A}_n^{2\pm}, \hat{S}_n^\mp] = 3(\hat{S}_n^z)^2 - 2$ što znači da je $\langle Q \rangle$ srazmerno srednjoj vrednosti kvadrata operatora \hat{S}^z . Vezu između ove veličine i magnetizacije je našao Kalen i ona izgleda:

$$\langle (\hat{S}^z)^2 \rangle = \frac{1 + 2\Phi + 2\Phi^2}{1 + 3\Phi + 3\Phi^2} \quad (3.46)$$

Naravno magnetizacija, odnosno σ , je data izrazom:

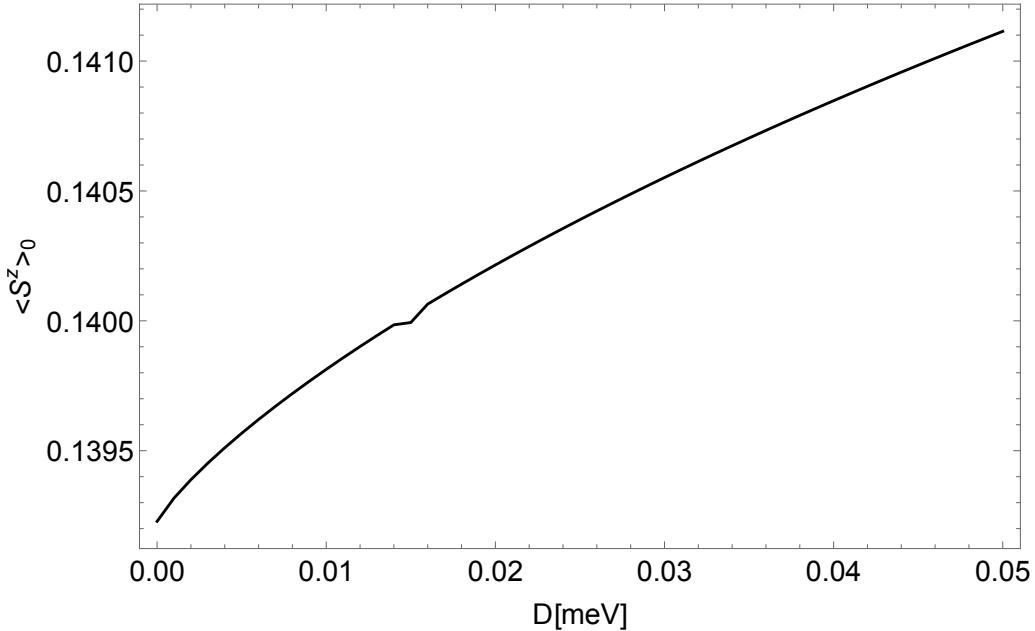
$$\sigma = \frac{1 + 2\Phi}{1 + 3\Phi + 3\Phi^2} \quad (3.47)$$

Kada $T \rightarrow 0$, $\coth(E/2\theta) \rightarrow 1$, magnetizacija na 0 K ima isti oblik kao sa gornje jednačine, ali sa $\Phi \rightarrow \Phi_0$, gde je:

$$\Phi_0 = \frac{1}{N} \sum_k \{P(E_1) + P(E_2) - 2(P(-E_1) + P(-E_2))\}$$

Na slici 3.16 data je zavisnost magnetizacije na apsolutnoj nuli od parametra anizotropije D . Vidimo da je magnetizacija rastuća funkcija anizotropijskog parametra, što smo i očekivali. Magnetizacija poprima niže vrednosti nego u prethodnim modelima.

Na slici 3.17 prikazana je magnetizacija u zavisnosti od temperature. Za parametar anizotropije D uzeta je vrednost od 0.0455 meV. Primetićemo da je vrednost magnetizacije na 0K mnogo manja nego u prethodnim slučajevima. Eksperimentalno izmerene vrednosti magnetnih momenata po atomu železa iznose $0.25 \mu_B$ [2], dok sa grafika možemo pročitati da je u ovom slučaju vrednost magnetizacije 0.14. Pošto magnetizacija na 0 K zavisi od izbora modela možemo povećati parametar anizotropije da bismo dobili slaganja sa eksperimentalnim

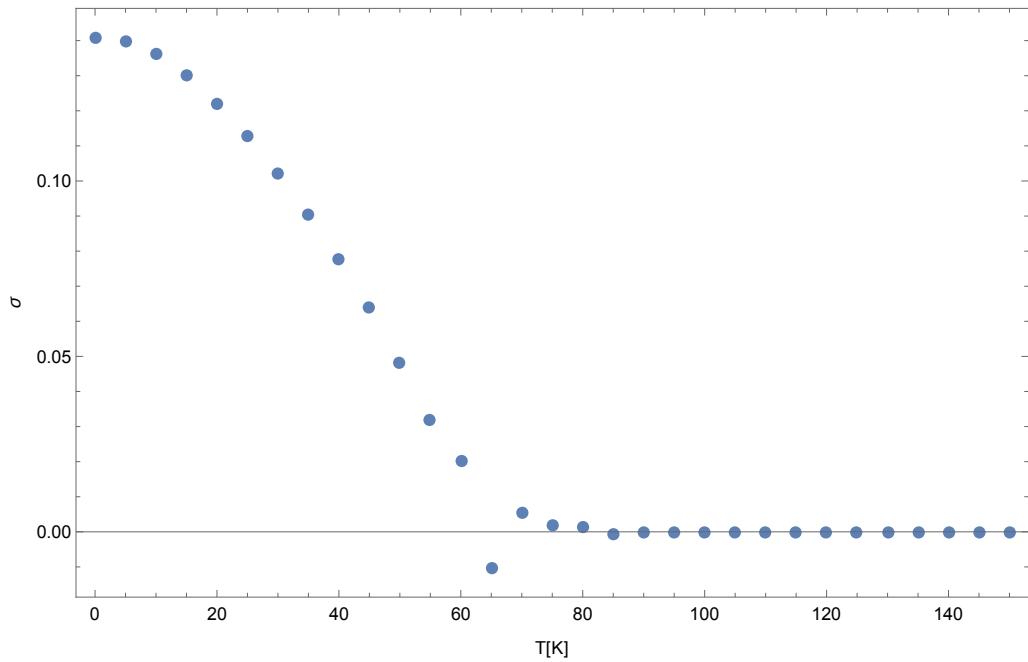


Slika 3.15: Magnetizacija na 0 K u zavisnosti od D

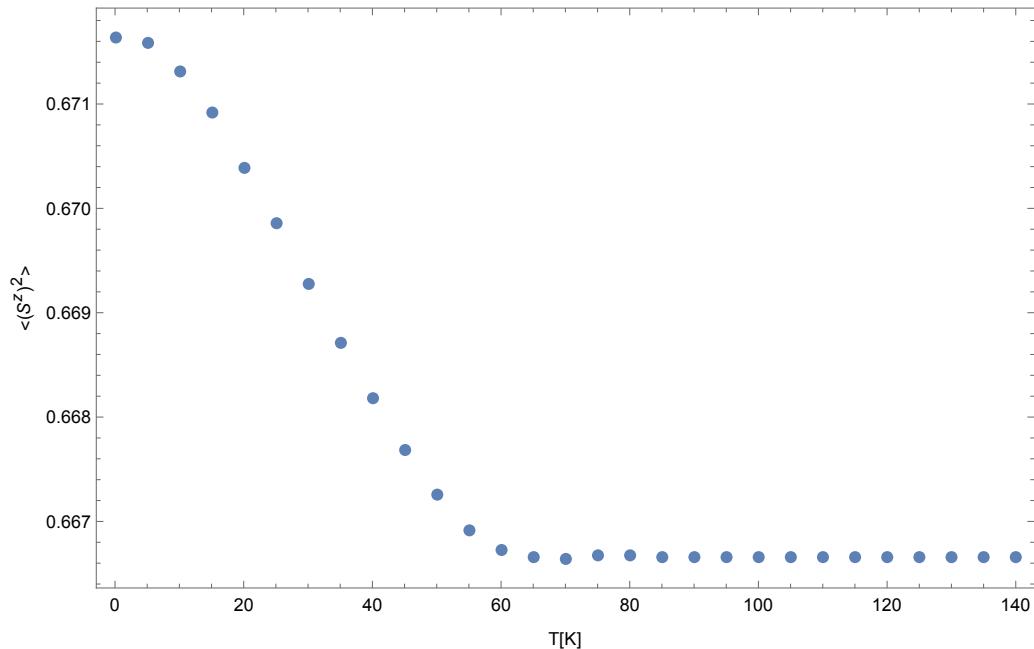
vrednostima. Dalje primećujemo da se vrlo dobro slažu vrednosti sa slike (3.16) (3.17) za magnetizaciju na apsolutnoj nuli.

Na sledećoj slici, slika 3.18, predstavljena je zavisnost $\langle (S^z)^2 \rangle$ od temperature. Ako se vratimo na Kalenov izraz za ovu veličinu, jednačina (3.36), i pustimo da $T \rightarrow \infty$ dobijamo da vrednost $\langle (S^z)^2 \rangle$ na visokim temperaturama teži $2/3$. To vidimo i na slići (3.18). U oba slučaja, i magnetizacije i “dipolnog momenta”, kritična temperatura je oko 60 K, što je manje nego ona koju smo očekivali za ovu vrednost parametra anizotropije.

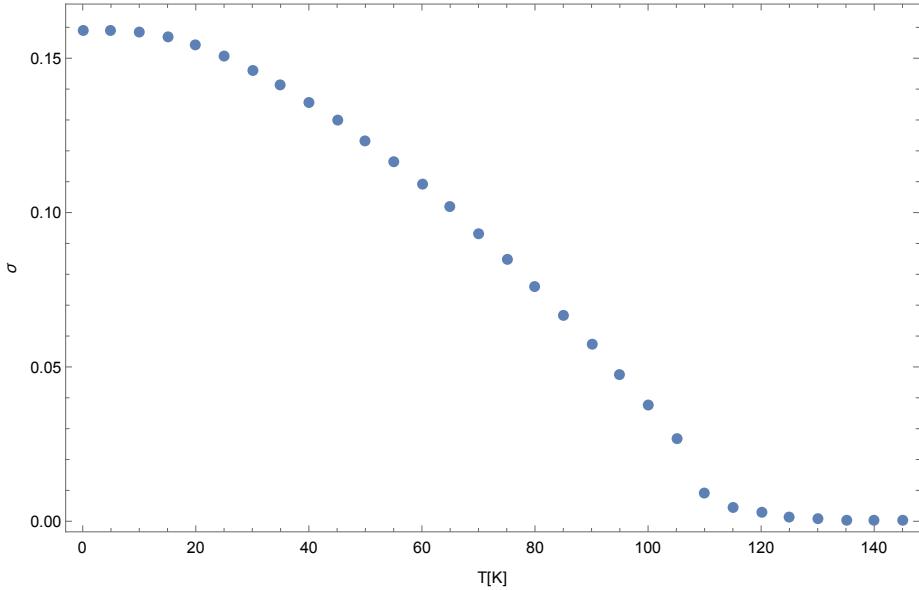
Pokušaćemo sa još jednom kombinacijom parametara. Najbolje rezultate daju modeli kod kojih je $2J_2 \approx J_{1a}$ i $J_{1a} \neq J_{1b}$. To su zajedničke osobine svih modela koji se proučavaju pri opisivanju ove grupe jedinjenja. Razlika dolazi od izbora J_c . Već smo napomenuli da on, iako bi trebao biti jako mali, ne sme biti jednak 0. Do sada je bio razmatran slučaj kada je $J_c = 0.0004 J_{1a}$. U radovima [12] i [13] za parametar J_c uzima se viša vrednost $J_c = 5$ meV ili $J_c = 0.1 J_{1a}$. Povećaćemo i $D = 0.05$ meV, tu vrednost koriste u radu [13]. Ukoliko uzmemo ove vrednosti dobijamo za magnetizaciju zavisnost prikazanu na slici 3.19. Magnetizacija na 0 K po ovom modelu se nije mnogo promenila. Sada iznosi $\langle S^z \rangle \approx 0.16$. Ovo ponovo nije dovoljno visoko kao što su eksperimentalne vrednosti, ali predstavlja popravku. Sa grafika možemo pretpostaviti i Nelovu temperaturu koja je sada mnogo bliža eksperimentalnoj, $T_N = 120$ K.



Slika 3.16: Magnetizacija u zavisnosti od temperature za $D = 0.0455$ meV

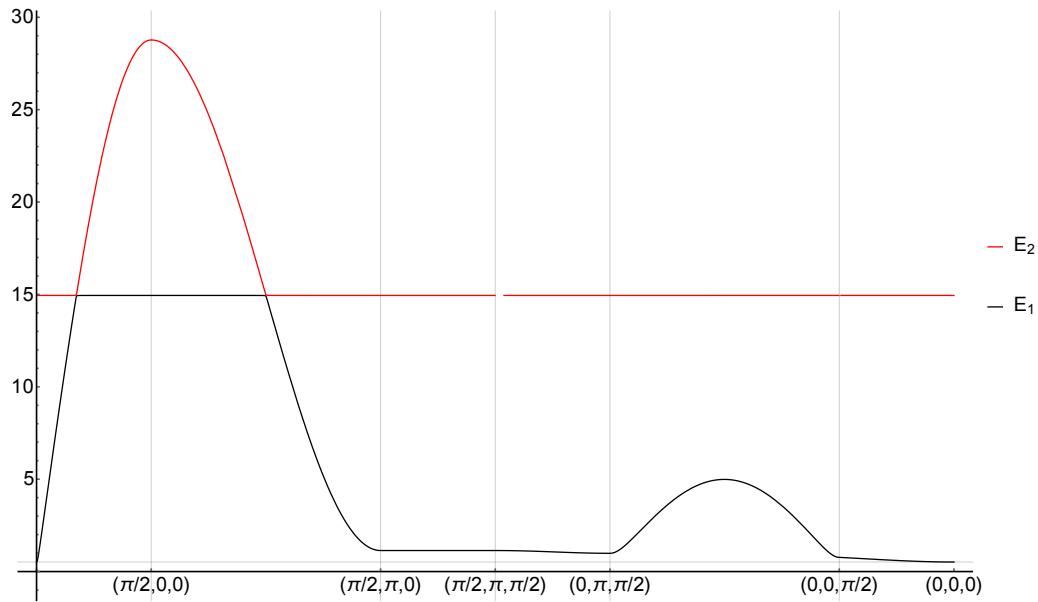
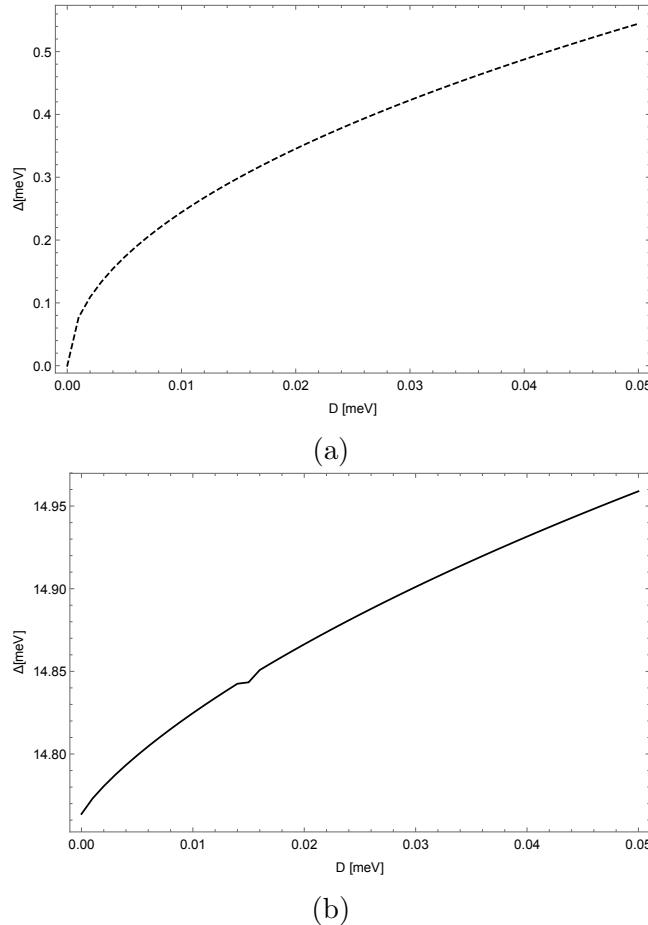


Slika 3.17: $\langle (S^z)^2 \rangle$ u zavisnosti od temperature

Slika 3.18: Magnetizacija za $D = 0.05$

Kao što smo već naglasili energija u ovom pristupu ima dve grane. To je novo u odnosu na ostale pristupe koji su imali samo jednu granu. Disperzije su prikazane na slici 3.20. Vidimo da su ove dve grane savršeno komplementarne. Npr. u obe grane postoji spin gep samo što za granu E_2 on iznosi oko 15 meV, što je poredeći sa ostalim spin gepovima, kod ostalih modela, viša vrednost. Za razliku od nje, grana E_1 ima spin gep veličine 0.5 meV što je podjednako udaljeno od očekivanih vrednosti. Prva grana ima plato energija u velikom opsegu talasnih vektora, što nismo imali kod ostalih modela. Nasuprot njoj grana E_2 pokazuje očekivano ponašanje u tom opsegu. U ostatku intervala grana E_2 ima plato na dosta visokim energijama, dok se sada grana E_1 ponaša sličnije prethodnim modelima.

Pogledajmo još vrednosti spin gepa u ove dve grane. Zavisnosti od temperature su date na slici 3.21. Za energijsku granu 1 spin gep je uvek ispod vrednosti $\Delta = 1$ meV, što je manje nego što smo očekivali. Očekivana vrednost bi bila oko 7 meV. Vidimo da zavisnost nije identična kao zavisnost magnetizacije od spina, što je posledica činjenice da ovaj spin gep ima član koji je slobodan od magnetizacije. Za razliku od njega, spin gep za drugu granu energije ima identičnu zavisnost kao i magnetizacija i vrednosti leže oko 15 meV-a. Ovo je u drugu ruku prevelika vrednost. Vidimo da pojedinačno nijedna od ovih grana ne reproducuje stvarnu disperziju spinskih talasa.

Slika 3.19: Energijski spektar za model [7] i $D = 0.0455$ 

Slika 3.20: Spin gep u zavisnosti od temperature.

a) Spin gep za granu energije E_1 b) Spin gep za granu energije E_2

Glava 4

Zaključak

Kao zadatak ovog rada se postavilo pitanje kako prisustvo anizotropije u hamiltonijanu utiče na rezultate nekih relevantnih fizičkih veličina prilikom modelovanja određene grupe materijala, u ovom slučaju pniktida sa osnovom gvožđa. Obrađeni su 2D i 3D modeli na dva načina, “bozonizacijom” hamiltonijana pomoću Holštajn-Primakovljeve transformacije u okviru Blohove aproksimacije i u spinskem formalizmu u aproksimaciji slučajnih faza (RPA). Uzete su dve vrste anizotropija, jednojonska i spinska anizotropija. Provera je vršena preko izračunavanja spin-gepa, energijske disperzije, magnetizacije i kritične temperature.

Za Devlinov metod dekuplovanja Grinovih funkcija dobili smo vrednosti magnetizacija oko $0.14 \mu_B$ što je niže nego dobijeni eksperimentalni podaci za oksipniktide ($0.25 \mu_B$ i $0.36 \mu_B$ [2]). Povećanje parametra anizotropije sa pretpostavljene vrednosti od 0.045 meV nije naročito popravilo rezultate magnetizacije na 0 K . Ostali modeli su dali više vrednosti magnetizacije na apsolutnoj nuli, od oko $0.5\text{-}0.7 \mu_B$. To se slaže sa rezultatima iz radova [2,24]. Ovi rezultati su u boljem slaganju sa eksperimentalnim rezultatima za magnetizaciju običnih pniktida (ne oksipniktida), oko $0.8 \mu_B$. Magnetizacija u zavisnosti od temperature je urađena za modele sa jednojonskom anizotropijom. Utvrđeno je da magnetizacija opada sa temperaturom što je bilo i očekivano. Vrednosti magnetizacije na 0 K dobijene direktim računanjem i one koje se mogu pročitati sa grafika zavisnosti magnetizacije od temperature se ne poklapaju za Anderson-Kalenovo dekuplovanje, dok je u slučaju Devlinovog dekuplovanja slaganje zadovoljavajuće. Jednu od prednosti Devlinovog dekuplovanja je pojava parametra $\langle Q \rangle = 3\langle(\hat{S}^z)\rangle - 2$, preko

koga možemo proveriti ispravnost našeg modela. Naime, za niske temperature zbog pojave anizotropije ovaj parametar bi trebalo da zadovoljava uslov $\langle Q \rangle \neq 0$ [10], što nije slučaj pri Anderson-Kalen i Naratovom dekuplovanju. U ovom radu na temperaturama $T > T_N$ vrednost ove veličine jeste mala i pozitivna i za temperature više od Nelove ona pada na nulu, baš kao što je i predviđeno.

Izbor parametra anizotropije u svim modelima smo vršili tako da model ima Nelovu temperaturu jednaku eksperimentalnoj za jedinjenje *LaOFeAs*, $T_N = 138$ K. U slučaju dvodimenzionog modela nije bilo moguće izabrati vrednost parametra anizotropije tako da se dobijena Nelova temperatura poklapa sa eksperimentalnom. Ustvari, dobijena je negativna vrednost za parametar δ što ne odgovara anizotropiji lake ose. U trodimenzionim modelima smo imali više uspeha. U modelu sa spinskrom anizotropijom vrednosti Nelove temperature od 138 K odgovara parametar anizotropije $\delta = 6.2 \cdot 10^{-4}$. Posmatrani su još neki modeli (sa drugim parametrima interakcije) i svi su imali vrednosti anizotropija u opsegu $0 < \delta < 0.01$. Model sa jednojonskom anizotropijom, u slučaju Anderson-Kalenovog dekuplovanja, dao je vrednost anizotropije $D = 0.045$ meV. Kao što smo rekli, za modele sa jednojonskom anizotropijom smo računali i zavisnosti magnetizacije od temperature. Sa ovih grafika se može pročitati temperatura na kojoj prestaje uređeno stanje ($\sigma \neq 0$). U slučaju Anderson-Kalenovog dekuplovanja temperatura na kojoj σ počinje da raste i Nelova temperatura se ne poklapaju. Sa druge strane, temperature na kojima prestaje uređeno stanje se poklapaju kod Anderson-Kalenovog i Devlinovog dekuplovanja, iako se magnetizacije na apsolutnoj nuli razlikuju. Ukoliko povećamo parametar anizotropije $D = 0.05$ meV-a, u slučaju Devlinovog dekuplovanja, temperatura prelaza se povećava do $T \sim 120$ K.

Spektri energija elementarnih ekscitacija duž nekih simetrijskih pravaca su prikazani na graficima za sve modele. U većini slučajeva slaganja između modela su veoma dobra. Nažalost nedostatak eksperimentalnih rezultata za jedinjenja oksipniktida nas onemogućava da proverimo upotrebljene modele u odnosu na ovu fizičku karakteristiku. Isti problem postoji i pri računanju odnosa spinskih brzina, kao i spin gepova. Eksperimentalni podaci postoje za pniktide bez prisustva kiseonika. Za ova jedinjenja spin gepovi za trodimenzione modele se dobro slažu sa eksperimentalnim podacima, sem u slučaju Devlinovog dekuplovanja. U ovom me-

todu dobijamo dve grane energija pobuđenja i nijedna od tih grana ne pruža zadovoljavajuće rezultate.

Kako smo u modelima koristili slučaj kada je $J_{1a} \approx J_{1b}$ i $J_{1a} \approx 2J_2$ na graficima spinskih talasa posmatramo vrednosti odnosa za $\alpha = 2$ i $\beta = 2$. Ovi rezultati se najbolje slažu sa eksperimentalnim iz [15] za vrednosti $\gamma = 0.004$, što je pet puta veća vrednost od one koju smo mi koristili. Odnos v_z/v_x eksperimentalno iznosi 0.28 što se ne slaže najbolje sa rezultatima iz ovog rada.

Trodimenzioni modeli su dali mnogo bolje rezultate od dvodimenzionih, što se slaže sa početnom pretpostavkom, da se u slučaju pniktida gvožđa interakcija između slojeva ne može zanemariti. Eksperimentalne rezultate smo uspeli u određenoj meri reproducirati u svim trodimenzionim modelima. Rezultati modela sa spinskom anizotropijom su dovoljno dobro reprodukovali Nelovu temperaturu, spin gep i odnose brzina spinskih talasa, dok za magnetizaciju smo dobili rezultate koji su se slagali sa rezultatima za neokspipniktide. Model sa jednojonskom anizotropijom rešavan Anderson-Kalenovim dekuplovanjem se u velikoj meri slaže sa rezultatima modela sa spinskom anizotropijom, što znači da su disperzija spinskih talasa, spin gep i odnosi spinskih brzina dali dobre ili bar zadovoljavajuće rezultate. Devlinov metod rešavanja je dao iznenađujuće različite rezultate za isti model u odnosu na Anderson-Kalenovo dekuplovanje. Rezultati magnetizacije se daleko bolje slažu u ovom modelu sa eksperimentalnim za oksipniktide. Analiza energijskih grana je izostala, pošto je očigledno potrebno bolje razumevanje i interpretacija pojave dve energijske grane u ovom modelu. Uzrok otežane analize krtične temperature u ovom slučaju leži u pojavi članova slobodnih od magnetizacije u izrazu za energiji elementarnih pobuđenja.

Dodatak A

Metod dvovremenskih temperaturnih Grinovih funkcija

Ovdje ćemo navesti osnovne informacije vezane za Grinove funkcije i njihovu primenu. Ovaj metod je u širokoj upotrebi u statističkoj fizici pošto ne samo da je efektivan način izračunavanja makroskopskih, eksperimentalno proverljivih, veličina nego i onih mikroskopskih, kao što su energija i vreme života elementarnih ekscitacija.

Uzmimo dva operatora $\mathcal{A}(t)$ i $\mathcal{B}(t')$ i neka su dati u Hajzenbergovoј slici (\mathcal{H} je hamiltonijan sistema):

$$\mathcal{A}(t) = e^{i\mathcal{H}t} \mathcal{A}(0) e^{-i\mathcal{H}t}; \quad \mathcal{B}(t') = e^{i\mathcal{H}t'} \mathcal{B}(0) e^{-i\mathcal{H}t'}$$

Jednačine kretanja ova dva operatora imaju oblik:

$$i \frac{d}{dt} \mathcal{A}(t) = [\mathcal{A}(t), \mathcal{H}]$$

Sada uvedimo vremensku korelacionu funkciju kao:

$$F_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}(t, t') = \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle$$

gde $\langle \dots \rangle$ označava srednju vrednost po kanonskom ili velikom kanonskom Gibsovom ansamblu:

$$\langle \dots \rangle = Q^{-1} \text{Tr}\{e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}} \dots\}, \quad Q = \text{Tr}\{e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}\} \quad (\text{A.1})$$

Možemo se lako uvjeriti da ove funkcije zavise samo od razlike vremenskih argumenata. Korišteći pravilo da je pod tragom (špurom) matrice dozvoljena ciklična promena operatora, kao i da operatori $E^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}$ i $E^{-i\mathcal{H}t'}$ komutiraju dobijamo:

$$\begin{aligned} \text{Tr}\{\mathcal{A}(t)\mathcal{B}(t')e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}\} &= \text{Tr}\{e^{i\mathcal{H}(t-t')}\mathcal{A}(0)e^{-i\mathcal{H}(t-t')}\mathcal{B}(0)e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}\} = \\ &= \text{Tr}\{\mathcal{A}(0)e^{-i\mathcal{H}(t-t')}\mathcal{B}(0)e^{i\mathcal{H}(t-t')}\mathcal{B}(0)e^{-\frac{\mathcal{H}}{\theta}}\} \end{aligned}$$

odakle slijedi da je:

$$F_{\mathcal{A},\mathcal{B}}(t, t') = F_{\mathcal{A},\mathcal{B}}(t - t')$$

Tražeći vremenski izvod ove korelaceione funkcije, kako bismo mogli da znamo vremensku evo-luciju sistema, dobijamo lanac ili seriju korelacionih funkcija sve višeg reda. Da bismo izvukli neke rezultate iz ovog rastućeg reda spregnutih funkcija moramo nekako presjeći ovaj niz, de-kuplovati. Zato se prebacujemo u formalizam Grinovih funkcija definišući ih kao¹

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A},\mathcal{B}}^{(r)}(t, t') &= \langle\langle \mathcal{A}(t)|\mathcal{B}(t')\rangle\rangle^r = \theta(t - t')\langle[\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')]_\eta\rangle \\ G_{\mathcal{A},\mathcal{B}}^{(a)}(t, t') &= \langle\langle \mathcal{A}(t)|\mathcal{B}(t')\rangle\rangle^a = -\theta(t - t')\langle[\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')]_\eta\rangle \\ G_{\mathcal{A},\mathcal{B}}^{(c)}(t, t') &= \langle\langle \mathcal{A}(t)|\mathcal{B}(t')\rangle\rangle^c = \langle T_\eta \mathcal{A}(t)\mathcal{B}(t')\rangle \end{aligned}$$

¹(r) za retardovane, (a) za avansovane i (c) za kauzalne

gde je:

$$[\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')]_{\eta} = \mathcal{A}(t)\mathcal{B}(t') - \eta\mathcal{B}(t')\mathcal{A}(t)$$

$$T_{\eta}\mathcal{A}(t)\mathcal{B}(t') = \theta(t-t')\mathcal{A}(t)\mathcal{B}(t') + \eta\theta(t'-t)\mathcal{B}(t')\mathcal{A}(t)$$

$$\theta(x) = \begin{cases} 1 & \text{ako je } x > 0 \\ 0 & \text{ako je } x < 0 \end{cases}$$

Ovdje η uzima vrednosti $\eta = \pm 1$ i odabir zavisi od pogodnosti, a ne od karakteristika operadora i njihovih komutacionih relacija. Inače, obično se uzima $\eta = 1$ za Boze operatore, a $\eta = -1$ za Fermijeve. Dalje, kako je Grinova funkcija po definiciji kombinacija korelacionih funkcija tako i za Grinove funkcije važi:

$$G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}(t, t') = G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}(t - t')$$

Takođe, pošto su Grinove funkcije su linearne u odnosu na operatore \mathcal{A} i \mathcal{B} važi i sledeće:

$$\langle \langle \alpha_1 \mathcal{A}_1 + \alpha_2 \mathcal{A}_2 | \mathcal{B} \rangle \rangle = \alpha_1 \langle \langle \mathcal{A}_1 | \mathcal{B} \rangle \rangle + \alpha_2 \langle \langle \mathcal{A}_2 | \mathcal{B} \rangle \rangle$$

Potražimo jednačinu kretanja za Grinovu funkciju. Pre toga uradimo vremenski izvod izraza $\theta(t - t')$:

$$\frac{d}{dt} \theta(t - t') = \delta(t - t')$$

Ovdje je $\delta(t - t')$ Dirakova-delta funkcija. Jednačina kretanja Grinove funkcije je:

$$i \frac{d}{dt} G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}^j(t - t') = i\delta(t - t') \langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')] \rangle^j + \theta(t - t') \langle [[\mathcal{A}, \mathcal{H}], \mathcal{B}] \rangle^j$$

Sada uvedimo par oznaka radi jednostavnosti zapisa. Kako $\delta(t - t')$ ima vrednosti različite od nule samo za $t = t'$ mi možemo veličinu $\langle [\mathcal{A}(t), \mathcal{B}(t')] \rangle$ označiti sa Q . Dalje vidimo iz drugog člana sa desne strane da smo iskoristili jednačinu kretanja za operatore $i \frac{d}{dt} \hat{A} = [\hat{A}, \mathcal{H}]$ pa nam drugi član izgleda kao u gornjoj jednačini. Dalje ćemo njega označavati kao $\Gamma_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}^j(t - t')$ i to je

viša Grinova funkcija. Konačno gornja jednačina ima oblik:

$$i \frac{d}{dt} G^j(t - t') = i\delta(t - t')Q + \Gamma^j(t - t')$$

Dalje možemo potražiti jednačinu kretanja za $\Gamma(t)$ pri čemu bi dobili Grinovu funkciju jednog reda višu od $\Gamma(t)$ i tako dalje. Jasno je da bi ovom metodom dobili beskonačan niz ili lanac funkcija za određivanje početne $G(t)$. Očigledno da ovaj posao ne bi urođio plodom i ne bismo ovom metodom mogli da rešimo ovaj problem. Zato ovaj lanac treba negde preseći. Taj metod zatvaranja lanca Grinovih funkcija nazivamo dekuplovanjem. Cilj je, u okviru neke aproksimacije, višu Grinovu funkciju izraziti nižom čime bi se lanac jednačina zatvorio. Opšti model dekuplovanja ne postoji i on je specifičan za svaki dati problem.

Izvršimo vremenski Furije transform Grinovih funkcija:

$$\begin{aligned} G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}^j(t - t') &= \int_{-\infty}^{\infty} G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}^j(E) e^{-iE(t-t')} \\ G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}^j(E) &= \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} G_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}^j(t - t') e^{iE(t-t')} \end{aligned}$$

Onda jednačina kretanja za Grinovu funkciju ima oblik:

$$E \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_E^j = \frac{i}{2\pi} \langle [\mathcal{A}, \mathcal{B}] \rangle + \langle \langle \mathcal{A} | \mathcal{B} \rangle \rangle_E^j$$

Spektralna reprezentacija

Pogledajmo korelace funkcije koje ulaze u sastav Grinovih funkcija:

$$\mathcal{J}_{\mathcal{A}, \mathcal{B}}(t - t') = \langle \mathcal{A}(t) \mathcal{B}(t') \rangle$$

$$\mathcal{J}_{\mathcal{B}, \mathcal{A}}(t - t') = \langle \mathcal{B}(t') \mathcal{A}(t) \rangle$$

One su potrebne kako bismo došli do izraza koji povezuje statističke srednje vrednosti nekih veličina i Grinove funkcije.

Neka su $|k\rangle$ i E_k svojstvena stanja i svojstvene vrednosti hamiltonijana posmatranog sistema.

Takođe, koristimo statistički operator kanoničkog ansambla za računanje srednjih vrednosti $\rho_0 = Q^{-1}e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}}$. Sada iskoristimo ove činjenice pri analiziranju korelacione funkcije:

$$\begin{aligned}\mathcal{J}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}(t - t') &= \text{Tr}\{\mathcal{B}(t')\mathcal{A}(t)\rho_0\} = \frac{1}{Q} \sum_k \left\langle k \left| \mathcal{B}(t')\mathcal{A}(t)e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}} \right| k \right\rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \mathcal{B}(t') | l \rangle \langle l | \mathcal{A}(t)e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}} | k \rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \left\langle k \left| e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} \mathcal{B} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t'} \right| l \right\rangle \langle l | e^{\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} \mathcal{A} e^{-\frac{i}{\hbar} \mathcal{H} t} e^{-\frac{\mathcal{H}}{k_B T}} | k \rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \mathcal{B} | l \rangle \langle l | \mathcal{A} | k \rangle e^{-\frac{E_k}{k_B T}} e^{-i \frac{E_k - E_l}{\hbar} \tau}\end{aligned}$$

Uveli smo označku $\tau = t - t'$ i iskoristili smo svojstvo kompletnosti skupa svojstvenih vektora $|k\rangle$, $\sum_k |k\rangle \langle k| = 1$, kao i jednakost da je $F(\mathcal{H})|k\rangle = F(E_k)|k\rangle$. Pređimo sada u E reprezentaciju, odnosno uradimo Furije transform korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE\tau} \mathcal{J}(\tau)$$

kao i:

$$\frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} e^{i(E - E_k + E_l)\tau} = \delta(E - E_k + E_l)$$

gde je $\delta(x)$ Dirakova delta funkcija. Konačno Furije transform ima oblik:

$$\mathcal{J}_{\mathcal{B}\mathcal{A}}(E) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \mathcal{B} | l \rangle \langle l | \mathcal{A} | k \rangle e^{-\frac{E_k}{k_B T}} \delta(E - E_k + E_l)$$

Vidimo iz poslednje relacije da korelaciona funkcija ima singularitet na energiji $E_k - E_l$. Razlika $E_k - E_l$ predstavlja energiju pobuđenja sistema iz stanja $|k\rangle$ u stanje $|l\rangle$.

Analogno dolazimo do izraza za korelacionu funkciju $\mathcal{J}_{\mathcal{A}\mathcal{B}}$ i ona ima oblik u E reprezentaciji:

$$\mathcal{J}_{\mathcal{A}\mathcal{B}}(E) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \mathcal{B} | l \rangle \langle l | \mathcal{A} | k \rangle e^{-\frac{E_k}{k_B T}} e^{\frac{E_k - E_l}{k_B T}} \delta(E - (E_k - E_l))$$

Kako zbog delta funkcije ovo ima smisla samo za $E = E_k - E_l$ konačan oblik ove jednakosti je:

$$\mathcal{J}_{AB}(E) = e^{\frac{E}{k_B T}} \mathcal{J}_{BA}(E)$$

Veličine $\mathcal{J}_{AB}(E)$ i $\mathcal{J}_{BA}(E)$ se nazivaju spektralne intenzivnosti ili spektralne funkcije date korelace funkcije.

Sada odredimo sprektralnu reprezentaciju Grinovih funkcija, odnosno uspostavimo vezu između Furije-komponenata Grinove funkcije i odgovarajućih komponenata korelace funkcije. Uradimo vremenski Furije transform Grinove funkcije:

$$G(E) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{iE\tau} G(\tau)$$

Ako tražimo vezu između Furije likova koreacionih funkcija i Grinovih funkcija moramo znati i Furije lik od Hevisajdove funkcije ($\theta(\tau)$). Koristeći jednakost $\delta(\tau) = \frac{d}{d\tau}\theta(\tau)$, dolazimo do $\theta(\tau) = \int d\tau \delta(\tau)$. Već je poznat razvoj delta funkcije:

$$\begin{aligned} \theta(\tau) &= \int d\tau \delta(\tau) = \frac{1}{2\pi} \int d\tau \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE\tau} = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE \int d\tau e^{\epsilon\tau} e^{-iE\tau} = \\ &= \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} \frac{e^{-iE\tau}}{E + i\epsilon} \end{aligned}$$

Očigledno imamo pol u tački $E = -i\epsilon$, pa u slučaju da zatvaramo konturu u donjoj poluravni gde je $ImE < 0$ (kada je $\tau > 0$) teorema o reziduumu daje da je $\theta(\tau) = 1$. U slučaju da se kontura zatvara u gornjoj poluravni, tada je $\theta(\tau) = 0$ pošto u tom delu nema singulariteta. Za retardovanu funkciju po definiciji imamo:

$$G^r(\tau) = \theta(\tau)[\mathcal{J}_{AB} - \eta \mathcal{J}_{BA}]$$

Sada ćemo izvršiti već navedene Furije transformacije i koristeći poslednju jednakost iz prošlog dela dobijamo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} dE'' G^r(E'') = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE'' dE' \frac{(e^{E'/k_B T} - \eta) \mathcal{J}_{BA}}{E'' + i\epsilon} e^{-i(E'' + E')\tau}$$

Sada obe strane ove jednakosti pomnožimo sa $e^{iE\tau}$ i sve prointegralimo po τ u granicama $\{-\infty, \infty\}$. Dobijamo:

$$2\pi G^r(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' dE'' \frac{(e^{E'/k_B T} - \eta)\mathcal{J}_{BA}}{E'' + i\epsilon} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E'-E'')\tau}$$

Poslednji član na desnoj strani daje delta funkciju $\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(E-E'-E'')\tau} = 2\pi\delta(E - E' - E'')$, što ukida integraciju po E'' i svako E'' zamenjuje sa E' .

$$G^r(E) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{(e^{E'/k_B T} - \eta)\mathcal{J}_{BA}}{E - E' + i\epsilon}$$

Ukoliko je poznata funkcija $G_{AB}(E)$ iz nje možemo dobiti korelacionu funkciju \mathcal{J}_{BA} . Koristićemo relaciju:

$$\frac{1}{x \pm i\epsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x)$$

Simbol \mathcal{P} označava glavnu vrednost integrala. Dobijamo:

$$\begin{aligned} G(E + i\epsilon) &= \mathcal{P} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{(e^{E'/k_B T} - \eta)\mathcal{J}_{BA}(E')}{E - E'} + \frac{1}{2}(e^{\frac{E}{k_B T}} - \eta)\mathcal{J}_{BA}(E) \\ G(E - i\epsilon) &= \mathcal{P} \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} dE' \frac{(e^{E'/k_B T} - \eta)\mathcal{J}_{BA}(E')}{E - E'} - \frac{1}{2}(e^{\frac{E}{k_B T}} - \eta)\mathcal{J}_{BA}(E) \end{aligned}$$

Oduzmemmo li poslednje dvije relacije dobijamo izraz za spektralnu intenzivnost korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{BA}(E) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \frac{G(E + i\epsilon) - G(E - i\epsilon)}{e^{\frac{E}{k_B T}} - \eta}$$

što za korelacionu funkciju daje:

$$\mathcal{J}_{BA}(\tau) = \lim_{\epsilon \rightarrow 0} \int_{-\infty}^{\infty} dE e^{-iE\tau} \frac{G(E + i\epsilon) - G(E - i\epsilon)}{e^{\frac{E}{k_B T}} - \eta}$$

Dodatak B

Magnetno-kristalografska (jednojonska) anizotropija

Posmatramo grupu jona železa. Kod njih je degeneracija $2L + 1$ energetskih nivoa usled interakcije sa kristalnim poljem daleko veća i od $k_B T$ i od LS sprege, pa moramo uzimati u obzir osnovno stanje u odnosu na kristalno polje. U većini jonskih kristala ove grupe magnetni joni se nalaze u centru oktaedra sačinjenog od anjona.

Hamiltonian kristalnog polja je realna funkcija, pa su onda i svojstvene funkcije ovog operatora tekođe realne funkcije. Sa druge strane, operator ukupnog ugaonog momenta L je imaginarni, pa su i očekivane vrednosti ovog operatora u odnosu na realne funkcije imaginarne. Pored toga, operator L je ermitski, što bi značilo da su njegovi dijagonalni članovi realne funkcije. Uzimajući ovo u obzir možemo zaključiti da su očekivane vrednosti angулarnog momenta po funkcijama osnovnog stanja jednake nuli, tj. $\langle 0|L|0 \rangle = 0$. To znači da je angулarni momenat ugašen u osnovnom nedegenerisanom stanju.

Uzmimo da su E_n i $|n\rangle$ energijski nivo i odgovarajuća svojstvena funkcija kristala u slučaju cijepanja energijskih nivoa zbog kristalnog polja. Funkcija $|n\rangle$ može biti orbitalni dio svojstvene funkcije mnogo - elektronskog sistema ili svojstvena funkcija odgovarajućeg hamiltonijana. U oba slučaja možemo je tumačiti kao proizvod orbitalnog i spinskog dela. U ovom slučaju smatramo da je orbitalni dio svojstvene funkcije u osnovnom stanju, dok je spinski slobodan. To bi značilo da je orbitalni momenat ugašen i magnetni momenat jona zavisi samo od spina.

Slobodni spin se veže uz rešetku samo ako uzmemo u obzir i LS sprezanje.

Posmatrajmo LS sprezanje i Zemanovu energiju kao perturbaciju:

$$V = \lambda \vec{L} \cdot \vec{S} + \mu_B \vec{H} \cdot (2\vec{S} + \vec{L})$$

Kako je spinski dio svojstvene funkcije nezavistan od orbitalnog, spin ostaje kao operator u ovom hamiltonijanu. Zbog gašenja orbitalnog momenta u slučaju prve popravke dobijamo rezultat:

$$\Delta E^{(1)} = 2\mu_B \vec{H} \cdot \vec{S}$$

Za drugu popravku energije dobijamo izraz:

$$\Delta E^{(2)} = - \sum_{\mu, \nu} [\lambda^2 \Lambda_{\mu\nu} S_\mu S_\nu + 2\lambda \mu_B \Lambda_{\mu\nu} H_\mu S_\nu + \mu_B^2 \Lambda_{\mu\nu} H_\mu H_\nu]$$

gde je:

$$\Lambda_{\mu\nu} = \sum_n \frac{\langle 0 | L | n \rangle \langle n | L | 0 \rangle}{E_n - E_0}, \quad \mu, \nu = \{x, y, z\}$$

Efektivni hamiltonijan za nedegenerisano osnovno stanje usled cijepanja zbog kristalnog polja je:

$$\mathcal{H}_S = \sum_{\mu\nu} [2\mu_B H_\mu (\delta_{\mu\nu} - \lambda \Lambda_{\mu\nu}) S_\nu - \lambda^2 S_\mu \Lambda_{\mu\nu} S_\nu - \mu_B^2 H_\mu \Lambda_{\mu\nu} H_\nu]$$

Prvi član je efektivna Zemanova energija u kojoj je faktor g zamijenjen tenzorom: $g = 2(\delta_{\mu\nu} - \lambda \Lambda_{\mu\nu})$. Drugi član predstavlja anizotropijski spin hamiltonijan, koji predstavlja energiju anizotropije zbog pravca spina. Uzmimo za osnove ose kristala x, y i z i označimo odgovarajuće

komponente Λ sa Λ_x , Λ_y i Λ_z . Tada anizotropijski spin hamiltonijan može biti zapisan kao:

$$\mathcal{H} = -\lambda^2 \left[\frac{1}{3}(\Lambda_x + \Lambda_y + \Lambda_z)S(S+1) + \frac{1}{3}(\Lambda_z - \frac{1}{2}(\Lambda_x + \Lambda_y)) \times \right. \\ \left. (3S_z^2 - S(S+1)) + \frac{1}{2}(\Lambda_x - \Lambda_y)(S_x^2 - S_y^2) \right]$$

Zanemarivši konstante članove uz $S(S+1)$ dobijamo:

$$\mathcal{H} = DS_z^2 + E(S_x^2 - S_y^2)$$

U slučaju da je S cijeli broj prvi član u hamiltonijanu cijepa energiju u S dvostruko degenerisanih nivoa: $S_z = \pm S; \pm(S-1); \dots; \pm 1$ i jedan nedegenerisan sa $S_z = 0$. Drugi član hamiltonijana ima konačne matrične elemente između stanja sa $\Delta S_z = \pm 2$. Time dvostruko degenerisani nivoi koji su postignuti prvim članom se cijepaju zbog drugog člana i time je $(2S+1)$ degeneracija energetskih nivoa kompenzovana anizotropijskim hamiltonijanom. U slučaju da je S polucijeli broj, imamo $S+1/2$ dvostruko degenerisanih nivoa $\Delta S_z = \pm S; \pm(S-1); \dots; \pm 1/2$. Ali kako je S sada polucijeli broj za drugi član hamiltonijana nemamo matričnih elemenata tako da dvostruka degeneracija usled prvog člana ostaje. Slučaj polucijelog spina se odnosi na sisteme sa neparnim brojem elektrona koji ne mogu u potpunosti da uklone degeneraciju, ostaju dvostruko degenerisani nivoi. Ovo je *Kramersova teorema*, a dvostruko degenerisani nivoi *Kramersovi dubleti*.

Treći član u hamiltonijanu, $\mathcal{H}^{(3)} = -\mu_B^2 H_\mu \Lambda_{\mu\nu} H_\nu$, nema veze sa LS spregom već dolazi od druge popravke Zemanove energije za orbitalni ugaoni momenat. On daje temperaturno nezavisnu (anizotropijsku) paramagnetnu susceptibilnost, koja se zove *Van-Flekov orbitalni paramagnetizam*. Van Flekov orbitalni paramagnetizam daje nezanemarljive doprinose u slučaju da energija pobuđenih nivoa nije previše velika.

U slučaju kubne simetrije, promena efektivne vrednosti g i orbitalni paramagnetizam su konačni i izotropski, pošto je efektivni hamiltonijan za kubne sisteme u drugoj popravci izotropan (anizotropijski dio je konstanta). Anizotropija u ovom slučaju se javlja tek u četvrtom

koraku i ima oblik:

$$\mathcal{H}_S = \frac{a}{6} [S_x^4 + S_y^4 + S_z^4 - \frac{1}{5}S(S+1)(3S(S+1)-1)]$$

Za drugu popravku anizotropijski dio nestaje u slučaju $S = 1/2$, čak i za niže simetrije, kao što je oktaedarska, dok je za četvrtu popravku u kubnim sistemima anizotropijski dio konstanta za $S < 2$.

Literatura

- [1] Y. Kamihara, H. Hiramatsu, M. Hirano, R. Kawamura, H. Yanagi, T. Kamiya, H. Hasono, J. Am. Chem. Soc. **128**, 10012 (2006)
- [2] Yuri Izyumov, Ernst Kurmaev, *High T_c Superconductors based on FeAs Compounds*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (2010)
- [3] W.L. Yang, *et al.* *Evidence for weak electronic correlations in iron pnictides*, Phys. Rev. B **80**, 014508 (2009)
- [4] Soshin Chikazumi, *Physics of Ferromagnetism*, Oxford University Press, New York (2009)
- [5] K. Yoshida, *Theory of Magnetism*, Springer-Verlag Berlin Heidelberg (1996)
- [6] Norberto Majlis, *The Quantum Theory of Magnetism*, World Scientific Publishing Co. Pte. Ltd., Singapore (2007)
- [7] Gui-Bin Liu, Bang-Gui Liu, *Temperature-dependent striped antiferromagnetism of LaFe-AsO in a Green's function approach*, J. Phys.: Condens. Matter **21**, 195701 (2009)
- [8] S.V. Tyablikov, *Methods in the Quantum Theory of Magnetism*, Plenum, New York (1967)
- [9] Herbert B. Callen, *Green function theory of Ferromagnetism*, Phys. Rev. **130**, 890 (1962)
- [10] John F. Devlin, *Effect of Crystal-Field Anisotropy on Magnetically Ordered Systems*, Phys. Rev. B **4**, 136 (1971)

- [11] F.B. Anderson, H.B. Callen, Phys. Rev. **136**, A1068 (1964)
- [12] J. Zhao *et al.*, *Low Energy Spin Waves and Magnetic Interactions in SrFe₂As₂*, Phys. Rev. Lett. **101**, 167203 (2008)
- [13] Dao-xin Yao, E.W. Carlson, *Magnetic excitations of undoped iron oxypnictides*, Front. Phys. China, **5(2)**, 166170 (2010)
- [14] S.O.Diallo *et al.* *Itinerant Magnetic Excitations in Antiferromagnetic CaFe₂As₂*, Phys. Rev. Lett. **102**, 187206 (2009)
- [15] R.J. McQueeney *et al.* *Anisotropic Three-Dimensional Magnetism in CaFe₂As₂*, Phys. Rev. Lett. **101**, 227205 (2008)
- [16] T. Yildrim *Origin of the 150-K Anomaly in LaFeAsO: Competing Antiferromagnetic Interactions, Frustration, and a Structural Phase Transition*, Phys. Rev. Lett. **101**, 057010 (2008)
- [17] Daniel Stapanek, *Self-consisted spin wave theory for a frustrated Heisenberg model in the collinear phase and the application for the iron pnictides*, Diploma thesis, Lehrstuhl für Theoretische Physik I, Fakultät für Physik, Technische Universität Dortmund (2010)
- [18] Albert Narath, *Zero Field Cr⁵³ Nuclear Magnetic Resonance in Ferromagnetic CrI₃: Renormalized Spin-Wave and Green's Function Analysis*, Phys. Rev. **140**, A854 (1965)
- [19] M.E. Lines, *Sensitivity of Curie Temperature to Crystal Field Anisotropy I Theory*, Phys. Rev. **156**, 534 (1967)
- [20] M. Pantić, *Predavanja iz statističke fizike*, Skripta, Novi Sad, (2010)
- [21] M.Pantić, M. Škrinjar, D. Kapor, *The analytical treatment of magnetic properties of three layer ferrimagnetic superlattice* , Physica A **387**, 5786 (2008)

- [22] M. Vujinović, M. Pantić, D. Kapor, P. Mali, *Theoretical Models for Magnetic Properties of Iron Pnictides*,
Int. J. Mod. Phys. B **16**, 1350071 (2013)
- [23] Slobodan Radošević, *Termodinamička svojstva složenih antiferomagnetskih sistema opisanih Hajzenbergovim modelom*,
Doktorska disertacija, Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad (2012)
- [24] Rengui Zhu, Gangsan Hu, *Effects of the single-ion anisotropy on the striped antiferromagnetism of a frustrated Heisenberg model in a stacked square lattice*,
Physica B **419**, 76 (2013)
- [25] Stevan Armaković, *Modelovanje i analiza fundamentalnih svojstava sumanena*,
Doktorska disertacija, Univerzitet u Novom Sadu, Novi Sad (2014)

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA:

Redni broj:
RBR

Identifikacioni broj:
IBR

Tip dokumentacije: Monografska dokumentacija
TD

Tip zapisa: Tekstualni štampani materijal
TZ

Vrsta rada: Master rad
VR

Autor: Đorđe Dangić
AU

Mentor: Dr Milan Pantić
MN

Naslov rada: Primena Hajzenbergovog $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ modela
na pniktide
NR

Jezik publikacije: srpski (latinica)
JP

Jezik izvoda: srpski (latinica) / engleski
JI

Zemlja publikovanja: Srbija
ZP

Uže geografsko područje: Vojvodina
UGP

Godina: 2015
GO

Izdavač: Autorski reprint
IZ

Mesto i adresa: Prirodno-mateatički fakultet,

MA	Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad
Fizicki opis rada: FO	(poglavlja/strana/citata/tabela/grafika/dodataka) (4/69/25/1/32/2)
Naučna oblast: NO	Fizika
Naučna disciplina: ND	Teorijska fizika kondenzovane materije
Ključne reči: KR	Železni pnktidi, Hajzenbergov model, anizotropija, Grinove funkcije
Čuva se: ČU	Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu
Važna napomena: VN	nema
Izvod: IZ	Ovaj rad ispituje uticaj anizotropije u Hajzenbergovom modelu na neke relevantne fizičke veličine
Datum prihvatanja teme od NN veća: DP	
Datum odbrane: DO	
Članovi komisije: KO	
Predsednik komisije:	Dr. Milica Pavkov Hrvojević, redovni profesor Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad
Član:	Dr. Miodrag Krmar, redovni profesor Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad
Član:	Dr. Milan Pantić, mentor Prirodno-matematički fakultet, Novi Sad

UNIVERSITY OF NOVI SAD

FACULTY OF SCIENCE

KEY WORDS DOCUMENTATION:

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Documentation type:

Monograph publication

DT

Type of record:

Textual printed material

TR

Content code:

Final paper

CC

Author:

Đorđe Dangić

AU

Mentor:

Dr. Milan Pantić

MN

Title:

Application of Heisenberg
 $J_{1a} - J_{1b} - J_2$ model to pnictides

Language of text:

Serbian (latin)

LT

Language of abstract:

English

JI

Country of publication:

Serbia

CP

Locality of publication:

Vojvodina

LP

Publication year:

2015

PY

Publisher:

Author's reprint

PU

Publication place:

Prirodno-matematički fakultet,

PP	Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad
Physical description:	(4/69/24/1/32/2)
PD	
Scientific field:	Physics
SF	
Scientific discipline:	Theoretical Condensed Matter Physics
SD	
Key words:	Iron pnictides, Heisenberg model
KW	anisotropy, Green functions
Holding data:	Library of Department of Physics
HD	PMF-a u Novom Sadu
Note:	none
N	
Abstract:	This paper investigates influence of anisotropy
AB	in Heisenberg model on some relevant physical quantities
Accepted by the Scientific Board:	
ASB	
Defended on:	
DE	
Thesis defend board:	
DB	
President:	Dr. Milica Pavkov Hrvojević, Full Professor Faculty of Science, Novi Sad
Member:	Dr. Miodrag Krmar, Full Professor Faculty of Science, Novi Sad
Member:	Dr. Milan Pantić, Supervisor Faculty of Science, Novi Sad