

Природно-математички факултет
Радна заједница заједничких послова

Др.	:	15. VI. 1981
Оп.	:	СЛОДНОВИЋ
03	10	ИК

PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

UNIVERZITET U NOVOM SADU

Jovo M. Mihajlović

ИСТИТВАЊЕ ФАЗНОГ ПРЕЛАЗА И СПИНСКЕ ДЕВИЈАЦИЈЕ
КОД ЈЕДНОГ АНИЗОТРОПНОГ ФЕРОМАГНЕТИКА

- diplomski rad -

NOVI SAD

1981.

Zahvaljujem se mentoru, dr Mariju Škrinjaru, na pomoći u izboru teme, kao i u vodjenju prilikom izrade. Takodje se zahvaljujem i dr Darku Kaporu, na ukazanoj pomoći prilikom izrade rada.

Jovo M. Mihajlović

SADRŽAJ

1.	Uvod	1
2.	O jakom magnetizmu i jakim magnetnim materijalima	2
2.1	Jaki magnetizam	2
2.2	Jaki magnetni materijali	4
3.	Hamiltonijan izotropsnog i anizotropsnog feromagnetika	5
4.	Green-ove funkcije anizotropsnog feromagnetika	8
5.	Ispitivanje faznog prelaza	18
6.	Spinska devijacija na $\theta = 0$	23
7.	Zaključak	25
	Literatura	26

1. UVOD

Magnetna svojstva se javljaju u manjoj ili većoj mjeri u svim materijalima. Prema ovoj osobini čvrsta tela se mogu podeliti u slabe magnetike (dijamagnetičari i paramagnetičari) i jake magnetike (feromagnetičari, antiferomagnetičari i ferimagnetičari). U ovom radu ćemo se zadržati na pitanjima vezanim za teoriju jakog magnetizma.

Podsetimo se da slabi magnetici imaju magnetnu susceptibilnost blizu nule a da jaki magnetici imaju susceptibilnost mnogo veću od nule. Naime, za dijamagnetičke $\chi < 0$, za paramagnetičke $\chi > 0$ a za fero, antifero i ferimagnetičke $\chi \gg 0$.



2. O JAKOM MAGNETIZMU I JAKIM MAGNETNIM MATERIJALIMA

2.1. JAKI MAGNETIZAM

Prvu teoriju o magnetizmu dao je Vilhelm Weber. U svojoj teoriji on izmosu ideju da magnet predstavlja skup uređenih elementarnih magneta i da su sve magnetne pojave rezultat razuredjivanja tog uredjenog skupa. U toj svojoj teoriji Weber nije dao objašnjenje prirode elementarnih magneta, što pretstavlja glavni nedostatak te njegove teorije. Međutim, i kod savremenog tumačenja magnetizma polazi se od toga da je magnet sistem uredjenih elementarnih magneta, što je jedan od značajnih doprinosa Weberove teorije. Jaki magneti usled određenih uslova unutrašnje uredjenosti kristala ispoljavaju veliki makroskopski magnetni moment, a čija je veličina $N\mu_B$, gde je N broj uzoraka koji nose jedinični magnetni moment μ_B (μ_B = Borov magneton). Inače, klasično tumačenje jakog magnetizma, bolje rečeno fero-ferimagnetizma dao je Vajs u svojoj fenomenološkoj teoriji. Naime, prema njegovoj teoriji sve feromagnetne supstance pri temperaturi nižoj od neke kritične, ispoljavaju osobinu spontanog namagnetisanja iako je spoljne polje nula $\vec{H} = 0$. Da bi objasnio taj fenomen Vajs uvodi drugu teoriju da se svaki feromagnetik sastoji iz velikog broja domena spontano namagnetisanih. Domeni su inače za $\vec{H} = 0$ haotično rasporedjeni a za $\vec{H} \neq 0$ delimično se usmeravaju duž polja. Ako feromagnetik nije prethodno namagnetisan magnetni momenti domena su haotično rasporedjeni tako da je magnetizacija uzorka u celini jednaka nuli. Landau i Lifšic su pokazali da je domenska struktura prirodna posledica različitih doprinosa energije feromagnetskog tela koji potiču od interakcije razmene, anizotropije i magnetskog polja. Inače, domenska struktura feromagnetika

pokazuje se preko mikrofotografija dobijenih tehnikom praškastih figura.

Savremena teorija magnetizma razmatra jake magnetike kao sistem uredjenih spinova nepotpunjenih unutrašnjih 3d, 4f ljudski. Ipak, savremena teorija nije u mogućnosti da formuliše neophodne i dovoljne uslove pojave jakog magnetizma na osnovu elektronske konfiguracije atoma koji grade kristalnu rešetku. Uopštenije govoreći, magnetne osobine čvrstih tela zavise od raspodele gustine elektrona nepotpunjenih unutrašnjih ljudaka kao i gustine provodnih elektrona u kristalnoj rešetki. Kad unutrašnja ljudska nije popunjena magnetni moment je različit od nule, a iz vrednosti magnetno-mehaničkog odnosa momenata sa sops-tveni i orbitalni moment elektrona, zaključuje se da veći doprinos ukupnom magnetnom momentu nepotpunjene unutrašnje ljudske ima sopstveni spinski magnetizam. Energetski niže stanje je stanje sa paralelnim spinovima nego sa antiparalelnim te stoga pri snižavanju energije atoma dolazi do paralelne orientacije spinova. Naime, na taj način sistem spinova teži da zauzme što niži energetski nivo, ali tom procesu se suprotstavljuju haotične ter-mičke vibracije spinova. Ako se na nekom čvoru rešetke promeni vrednost projekcije spina, ovaj se poremećaj zbog sila izmene prenese na drugi čvor i tako se javlja talas zaljuljanih spinova - spinski talas. Kvante tih talasa nazivamo magnonima.

Navešćemo neke osnovne relacije koje povezuju magnetno polje i magnetizaciju.

Polje se najčešće obeležava sa \vec{H} a magnetna induk-cija sa \vec{B} . Negde se magnetizacija \vec{M} naziva i magnetna pola-rizacija \vec{P} . Veze izmedju ovih veličina su sledeće:

$$\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \vec{P}, \quad \vec{P} = \mu_0 \vec{H}, \quad \vec{M} = \chi \vec{H}, \quad \vec{B} = \mu_0 (\vec{H} + \vec{M})$$

Polarizacija se definiše kao $\vec{P} = \frac{d\vec{m}}{dv}$ broj magnetnih momenata po jedinici zapremlje. Prema gornjim relacijama to bi važilo onda i za magnetizaciju. Ako napišemo $\vec{B} = \mu_0 \vec{H} + \chi \mu_0 \vec{H} = \mu \mu_0 \vec{H}$ vidimo da je $\mu = 1 + \chi$ a ova veličina se naziva magnetna permeabilnost sredine dok se χ naziva magnetna susceptibilnost.

Magnetna susceptibilnost χ se definiše kao $\chi = \lim_{H \rightarrow 0} \frac{M}{H} = \frac{\partial M}{\partial H}$.

Češći je slučaj da se umesto magnetizacije \vec{M} razmatra relativna magnetizacija $\sigma = \frac{\langle \vec{S}_z^2 \rangle}{S}$ uzete po jednom čvoru rešetke i po jedinici magnetnog momenta. Relativna magnetizacija je funkcija temperature i na nekoj temperaturi θ_c (Kirijeva temperatura) postaje jednaka nuli, odnosno magnetik trpi fazni prelaz iz feromagnetske u paramagnetsku fazu.

Fazni prelaz zavisi od vrste magnetnog materijala i karakteriše se različitim Kirijevim temperaturama θ_c , koje su proporcionalne intenzitetu interakcije izmedju spinova.

Prvo se mislilo da su te interakcije po prirodi dipol-dipol interakcije magnetnih momenata, međutim, kvantna mehanika je pokazala da se radi o interakciji izmene medju elektronima nepotpunjenih ljudskih. Ocenjeno je da je ova energija izmene reda $100 - 1000 K_B$ što odgovara Kirijevim temperaturama poznatih feromagnetičara.

2.2. JAKI MAGNETNI MATERIJALI

Feromagnetičari. Tipični predstavnici su metali Fe , Co i Ni . Pri temperaturama manjim od Kirijeve svi spinovi u monokristalu su orijentisani paralelno, pri čemu se javlja veliki spontani magnetni moment. Ako je spoljašnje polje $\vec{H} \neq 0$ spinovi takođe i rezultujući moment orijentišu se u pravcu polja. Kad je $\vec{H} = 0$ rezultujući magnetni moment nije određen. Ali kako uvek postoji uticaj slabe anizotropije, onda se rezultujući magnetni moment usmeri duž jedne od osa lake magnetizacije. Kad raste temperatura magnetizacija se smanjuje. Iznad θ_c feromagnetičar se ponaša kao paramagnetičar, a u blizini θ_c magnetizacija se ponaša po sledećem zakonu

$$M = \text{const} \left(1 - \frac{\theta}{\theta_c}\right)^\beta$$

gde je β tzv. kritični eksponent ($\beta = 0,33 - 0,42$). Kad $\theta \rightarrow 0$ ova zavisnost ima stepeni karakter

$$M = M_0 (1 - A_1 \theta^{3/2} - A_2 \theta^{5/2} - \dots),$$

A_i su konstante, a M_0 magnetizacija zasićenja.

Ferimagnetići. Tipični predstavnici su kompleksne soli prelaznih metala: $Mn \cdot Fe_2O_3$, $FeO \cdot Fe_2O_3$, $CoO \cdot Fe_2O_3$ itd. Kristali feromagnetika se sastoje iz nekoliko magnetnih podrešetaka čiji se magnetni momenti ne kompenzuju, tako da postoji jedan rezultujući magnetni moment koji je različit od nule. Ako je spoljašnje magnetno polje $\vec{H} > \vec{H}_{kr}$ raste i magnetni moment proporcionalno sa poljem. Povećanjem polja dolje se do zasićenja magnetizacije.

Antiferomagnetići. Predstavnici antiferomagnetika su uglavnom neke kiseline i soli prelaznih metala: FeO , CoO , $NiSO_4$, CoF_2 , $RbMnF_3$ itd. Kristali antiferomagnetika se mogu prikazati kao skup dve ili nekoliko feromagnetnih podrešetaka postavljenih jedna na drugu. Za njih je karakteristično da im je rezultujući magnetni moment jednak nuli pri temperaturama nižim od Nelove temperature θ_N . Ako unesemo antiferomagnetik u spoljašnje polje $\vec{H} > \vec{H}_{kr}$ dolazi do magnetizacije koja linearno raste sa povećanjem spoljašnjeg polja i to do magnetizacije zasićenja. Naravno, ovo važi za slučaj $\theta < \theta_N$. Inače za slučaj $\theta > \theta_N$ antiferomagnetik se ponaša kao paramagnetik. Na $\theta = \theta_N$ imamo fazni prelaz druge vrste.

3. HAMILTONIJAN IZOTROPNOG I ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA

U glavi 2.1 rečeno je da je jak magnetizam definisan medjuspinskom interakcijom, u kojoj je dominantna interakcija izmena. Hajzenberg je 1928. godine pokazao da se hamiltonijan

feromagnetika može napisati na sledeći način (tzv. Hajzenbergov model):

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_{\vec{n}} \vec{S}_n^z - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n}, \vec{m} \\ \vec{n} \neq \vec{m}}} [I_{nm}^{x+} S_n^x S_m^x + I_{nm}^{y+} S_n^y S_m^y + I_{nm}^{z+} S_n^z S_m^z] \quad I_{nm}^{r+} = I_{nm} (\vec{n} - \vec{m})$$

U datom hamiltonijanu g pretstavlja Landeov faktor, \vec{H} jačinu s poljašnjeg polja, S_i^x, S_i^y, S_i^z projekciju spina a $I_{nm}^{x+}, I_{nm}^{y+}, I_{nm}^{z+}$ pretstavljaju intenzitete interakcije medju komponentama spinova, koji se nalaze u čvorovima \vec{m} i \vec{n} kristalne rešetke. Kad je $I_{nm}^{x+} = I_{nm}^{y+} = I_{nm}^{z+}$ imamo izotropni feromagnetik, a kada su I_{nm}^{r+} međusobno različiti onda imamo anizotropni feromagnetik ($r = x, y, z$). Napomenimo da veličine I_{nm}^{r+} ulaze u teoriju kao fenomenološki parametri. Pošto je za izotropni feromagnetik $I_{nm}^{x+} = I_{nm}^{y+} = I_{nm}^{z+}$ hamiltonian izotropnog feromagnetika ima sledeći oblik:

$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_{\vec{n}} \vec{S}_n^z - \frac{1}{2} \sum_{\substack{\vec{n}, \vec{m} \\ \vec{n} \neq \vec{m}}} I_{nm}^{++} \vec{S}_n \cdot \vec{S}_m \quad 3.1$$

Za anizotropni feromagnetik parametri I_{nm}^{r+} nisu isti za sve komponente, i tu mogu da postoje različite kombinacije. Tako naprimjer, ako je $I_{nm}^{x+} = I_{nm}^{y+} \neq 0$ a $I_{nm}^{z+} = 0$ imamo tzv. XY-model, a slučaj $I_{nm}^{x+} = I_{nm}^{y+} = 0$ i $I_{nm}^{z+} = I_{nm}^{++} \neq 0$ odgovara Izingovom modelu. U ovom radu razmotrićemo specijalan slučaj anizotropnog feromagnetika koji su razmatrali E. Beloritzky i R. Calalegno u radu [2]. Oni su razmatrali magnetne jone elementa grupe retkih zemalja sa neparnim brojem elektrona u kubnom kristalnom polju. Osnovno stanje takvih jona obično prestavlja Kramersov dublet, te se u tom slučaju svakom dubletu može pridružiti operator psuedo-spina $S = \frac{1}{2}$. Magnetni moment jona u tom slučaju je proporcionalan psuedo-spinu $\vec{M} = g\mu_B \vec{S}$ gde je g - Landeov faktor. Interakcija izmene medju ovim jonima u osnovnom stanju u opštem slučaju je anizotropna. Uzimajući u obzir moguće simetrije kubnog kristalnog polja i činjenicu da spinski hamiltonian za $S = \frac{1}{2}$ ne može sadržati sparivanja

koja nisu bilinearna po komponentama spina, gore pomenuti autori su pokazali da najopštiji oblik interakcije za par jona (i, j) u pravcu z ose ima oblik:

$$\hat{H}_{ij} = J_{\parallel} S_i^z S_j^z + J_{\perp} (S_i^x S_j^x + S_i^y S_j^y) \quad 3.2$$

Ako uvedemo oznake da je $J = -J_{\perp}$ i $J' = J_{\parallel} - J_{\perp}$, onda možemo pisati da je hamiltonijan ovog anizotropnog feromagnetika u opštem obliku:

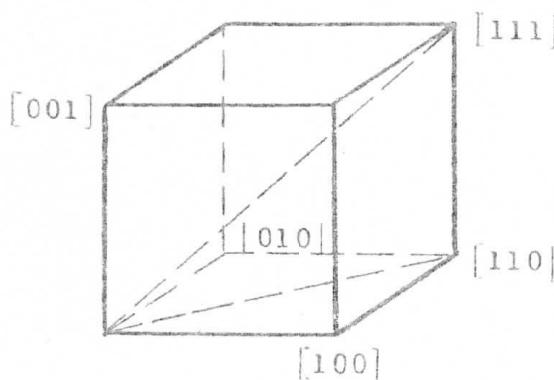
$$\hat{H} = -g\mu_B H \sum_i S_i^z - \frac{J}{2} \sum_{i < j} \sum_r S_i^r S_j^r + J' \sum_{i,r} S_i^r S_{i+r}^r \quad 3.3$$

Ako je u izrazu (3.3) $J' = 0$ dobijamo hamiltonijan izotropnog magnetika u spoljašnjem magnetnom polju. U radu [2] detaljno su analizirani uslovi stabilnosti gornjeg hamiltonijana. Pokazano je da su ose lake magnetizacije u kristalu ose četvrtog reda (npr. z osa [001]) i da se stabilna feromagnetna konfiguracija dobija kada su ispunjeni uslovi

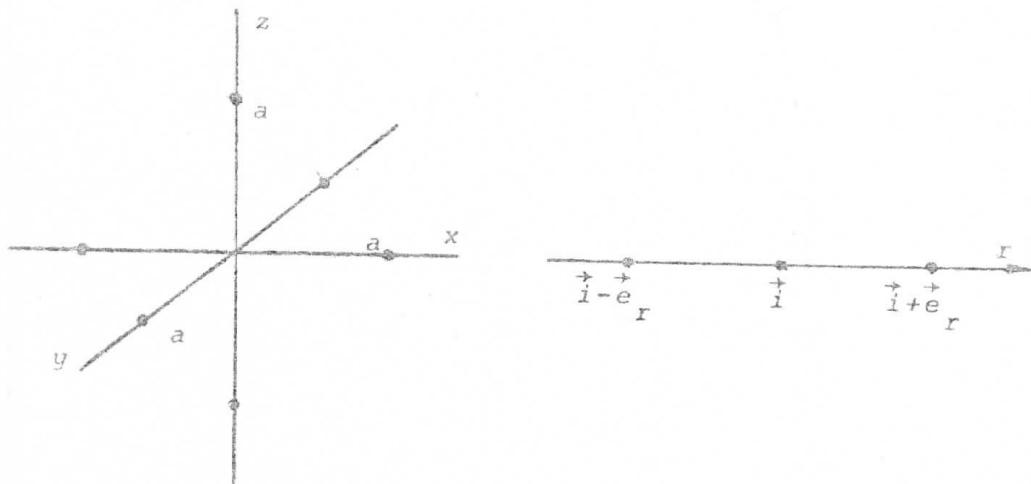
$$J_{\perp} < 0 \quad J_{\parallel} < 0 \quad 3.4$$

Imajući u vidu gore pomenute rezultate, u daljem radu ćemo analizirati anizotropni feromagnetik čiji je hamiltonijan dat izrazom (3.3) uz uslove (3.4).

Na slici 1. prikazana je elementarna kubna ćelija kao i glavne kristalografske ose, dok je na slici 2. prikazan način sumiranja po najbližim susedima u pravcu z-ose.



Slika 1.



Sl.2.

Označavanje kristalografskih osa dano je preko Milerovih indeksa h, k, l . Kad se stave u srednju zagradu $[hkl]$ tada označavaju ose a kad se stave u malu zagradu (hkl) označavaju ravni. Ako iznad indeksa stoji crta $[\bar{h}kl]$ onda ona označava negativnu vrednost. Indeks nula označava beskonačan otsečak po nekom pravcu. Za pravac $[001]$ -z-osa iz uslova stabilnosti dobija se najniža energija osnovnog stanja što pretstavlja najstabilniju uredjenost spinova.

4. GREEN-OVE FUNKCIJE ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA

Kako je već u poglavlju 3. rečeno da pravac $[001]$ pretstavlja osu lake magnetizacije (z-osa), relativnu magnetizaciju za spin $S = \frac{1}{2}$ definisaćemo kao srednju vrijednost z-komponente spina po čvoru rešetke

$$\sigma = \frac{\langle S_z^+ \rangle}{S} = 2 \langle S_z^+ \rangle_n \quad 4.1$$

Za izračunavanje magnetizacije i energije elementarnih eksitacija u feromagnetu koristićemo dvovremenske, temperaturske, komutatorske Green-ove funkcije

$$\langle\langle S_{(t)}^{\alpha} | S_{(t')}^{\beta} \rangle\rangle = \theta(t - t') \langle [S_{(t)}^{\alpha}, S_{(t')}^{\beta}] \rangle \quad 4.2$$

$$\alpha, \beta = x, y, z. \quad \theta(t-t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases}$$

Diferenciranjem izraza (4.2) po t i furije transformacijom po vremenu dobijamo jednačinu kretanja za Green-ove funkcije u energetskoj reprezentaciji,

$$E \langle\langle S_m^{\alpha} | S_n^{\beta} \rangle\rangle = \frac{1}{2\pi} \langle [S_m^{\alpha}, S_n^{\beta}] \rangle + \langle\langle [S_m^{\alpha}, \hat{H}] | S_n^{\beta} \rangle\rangle \quad 4.3$$

Komutatore koji figurišu u jednačini (4.3) izračunaćemo koristeći komutacione relacije za komponente spina:

$$[S_m^{\alpha}, S_n^{\beta}] = i \epsilon_{\alpha\beta\gamma} S_n^{\gamma} \delta_{n,m}^{\alpha}$$

$\epsilon_{\alpha\beta\gamma}$ pretstavlja simbol Levi Čivita čije su vrednosti:

$$\epsilon_{\alpha\beta\gamma} = \begin{cases} 0 & \text{ako su dva ili tri indeksa jednaka} \\ 1 & \text{za ciklične permutacije } \alpha, \beta, \gamma. \\ -1 & \text{za ostale slučajeve} \end{cases}$$

a $\delta_{n,m}^{\alpha}$ pretstavlja Kronekerov simbol.

Koristeći izraz (3.3) možemo pisati

$$[\hat{S}_m^{\alpha}, \hat{H}] = - \frac{J}{2} \sum_{\overset{i,j}{\rightarrow}} \sum_{\overset{r}{\rightarrow}} [S_m^{\alpha}, S_i^r S_j^r] + J' \sum_{\overset{i,r}{\rightarrow}} \sum_{\overset{i+er}{\rightarrow}} [S_m^{\alpha}, S_i^r S_{i+er}^r] -$$

$$- g\mu_B H \sum_i [S_m^{\alpha} S_i^z] \quad 4.5$$

Gornje komutatore računaćemo po pravilu:

$$[\hat{A}, \hat{B} \cdot \hat{C}] = [\hat{A}\hat{B}] \hat{C} + \hat{B}[\hat{A}, \hat{C}] \quad 4.6$$

$\hat{A}, \hat{B}, \hat{C}$ su neki opšti operatori, a u našem slučaju dobijamo:

$$[S_m^{\alpha}, S_i^r S_j^r] = [S_m^{\alpha}, S_i^r] S_j^r + S_i^r [S_m^{\alpha}, S_j^r] \quad 4.7$$

$$[S_m^{\alpha}, S_i^r S_{i+e_r}^r] = [S_m^{\alpha}, S_i^r] S_{i+e_r}^r + S_i^r [S_m^{\alpha}, S_{i+e_r}^r] \quad 4.8$$

Ako se svi komutatori u jednačini (4.5) izraze analogno izrazu (4.4) dobija se sledeća jednačina

$$\begin{aligned} [S_m^{\alpha}, H] &= - J \sum_{\gamma} \sum_{\alpha r \gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} S_m^{\gamma} S_j^r + J \sum_{\gamma} \sum_{\alpha r \gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} S_m^{\gamma} S_{m+e_r}^r + \\ &+ J \sum_{\gamma} \sum_{r \gamma} S_{m-e_r}^r S_m^{\gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} - g \mu_B H \sum_{\gamma} i \epsilon_{\alpha z \gamma} S_m^{\gamma} \end{aligned} \quad 4.9$$

kad se (4.9) uvrsti u (4.3) dobija se:

$$\begin{aligned} E \langle \langle S_m^{\alpha}, S_n^{\beta} \rangle \rangle &= \frac{1}{2\pi} i \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha \beta \gamma} \langle \langle S_m^{\gamma} | S_{n,m}^{\beta} \rangle \rangle - J \sum_{\gamma} \sum_{\alpha r \gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} \langle \langle S_m^{\gamma} S_j^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle + \\ &+ J \sum_{\gamma} \sum_{r \gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} \langle \langle S_m^{\gamma} S_{m+e_r}^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle + J \sum_{\gamma} \sum_{r \gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} \langle \langle S_m^{\gamma} S_{m-e_r}^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle - \\ &- g \mu_B H \sum_{\gamma} i \epsilon_{\alpha z \gamma} \langle \langle S_m^{\gamma} | S_n^{\beta} \rangle \rangle \end{aligned} \quad 4.10$$

Green-ove funkcije oblika $\langle \langle S_m^{\gamma} S_j^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle$ koje figurišu u (4.10) dekuplovaćemo na sledeći način:

$$\begin{aligned} \langle \langle S_m^{\gamma} S_j^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle &= \langle \langle S_m^{\gamma} G_{j,n}^{r\beta} \rangle \rangle + \langle \langle S_m^{\gamma} G_{mn}^{\beta} \rangle \rangle \\ \langle \langle S_m^{\gamma} S_{m+e_r}^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle &= \langle \langle S_m^{\gamma} G_{m+e_r,n}^{r\beta} \rangle \rangle + \langle \langle S_{m+e_r}^r G_{mn}^{\beta} \rangle \rangle \quad 4.11 \\ \langle \langle S_m^{\gamma} S_{m-e_r}^r | S_n^{\beta} \rangle \rangle &= \langle \langle S_m^{\gamma} G_{m-e_r,n}^{r\beta} \rangle \rangle + \langle \langle S_{m-e_r}^r G_{mn}^{\beta} \rangle \rangle \end{aligned}$$

U gornjim jednačinama uveli smo sledeće oznake:

$$\langle \langle S_m^{\alpha} | S_n^{\beta} \rangle \rangle \equiv G_{mn}^{\alpha\beta} \quad 4.12$$

Ako se izrazi (4.11) i (4.12) uvrste u (4.10) dobiće se sledeći sistem jednačina ($\alpha, \beta = x, y, z$):

$$\begin{aligned} EG_{mn}^{\alpha\beta} = & - \frac{1}{2\pi} \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_m^{\gamma} \rangle \delta_{m,n} - J \sum_{r\gamma} \sum_{x\gamma} i \epsilon_{\alpha x \gamma} [\langle S_m^{\gamma} \rangle G_{jn}^{x\beta} + \langle S_j^x \rangle G_{mn}^{\gamma\beta}] + \\ & + J' \sum_{r\gamma} \sum_{x\gamma} i \epsilon_{\alpha x \gamma} [\langle S_m^{\gamma} \rangle G_{m-e_x}^{x\beta} + \langle S_{m+e_x}^x \rangle G_{mn}^{\gamma\beta}] - g\mu_B H \sum_{\gamma} i \epsilon_{\alpha z \gamma} G_{mn}^{\gamma\beta} + \\ & + J' \sum_{r\gamma} \sum_{x\gamma} i \epsilon_{\alpha x \gamma} [\langle S_m^{\gamma} \rangle G_{m+e_x}^{x\beta} + \langle S_{m+e_x}^x \rangle G_{mn}^{\gamma\beta}] \end{aligned} \quad 4.13$$

Furije transformacijom oblika $A_{ab}^{\alpha\beta} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} A(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{a}-\vec{b})}$ gornji

sistem jednačina (4.13) u impulsnom prostoru, dobija sledeći koncizniji oblik:

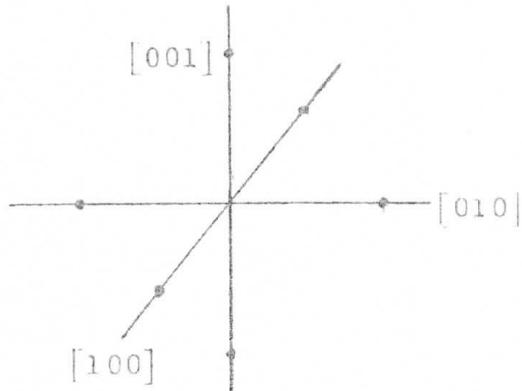
$$\begin{aligned} EG(\vec{q}) = & - \frac{1}{2\pi} \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha x \gamma} \langle S_m^{\gamma} \rangle - J \sum_{r\gamma} \sum_{x\gamma} i \epsilon_{\alpha x \gamma} \langle S_m^{\gamma} \rangle G^{x\beta}(\vec{q}) \sum_j e^{i\vec{q}(\vec{j}-\vec{m})} - g\mu_B H \sum_{\gamma} i \epsilon_{\alpha z \gamma} G^{\gamma\beta}(\vec{q}) \\ & + J' \sum_{r\gamma} \sum_{x\gamma} \epsilon_{\alpha x \gamma} [\langle S_m^{\gamma} \rangle G^{x\beta}(\vec{q}) e^{i\vec{q}e_x} + \langle S_{m+e_x}^x \rangle G^{\gamma\beta}(\vec{q}) + \langle S_m^{\gamma} \rangle G^{x\beta}(\vec{q}) e^{-i\vec{q}e_x} + \\ & + \langle S_{m-e_x}^x \rangle G^{\gamma\beta}(\vec{q})] - JN \sum_{r\gamma} \sum_{x\gamma} i \epsilon_{\alpha x \gamma} \langle S_j^x \rangle G^{\gamma\beta}(\vec{q}) \end{aligned} \quad 4.14$$

Pošto su srednje vrednosti spina iste u svim čvorovima rešetke zbog translatorne invarijantnosti, u (4.14) uvodimo oznake

$$\langle S_n^{\alpha} \rangle = \langle S^{\alpha} \rangle \quad \text{za } \alpha = x, y, z$$

U jednačini (4.14) N predstavlja broj čvorova u kristalnoj rešetci. Zbog činjenice da integrali izmene brzo opadaju sa

rastojanjem medju spinovima sve račune izvešćemo u aproksimaciji najbližih suseda. Na slici 3. su prikazani najbliži susedi za prostu kubnu rešetku koju ćemo analizirati u ovom radu.



Sl.3.

Ako uvedemo sledeće oznake

$$\begin{aligned} J_0 &= 6J, & J_{\vec{q}} &= \sum_j e^{-i\vec{q}(\vec{m}-\vec{j})} \\ J'_0 &= 2J', & J'_{\vec{q}\gamma} &= 2J' \cos q_\gamma a. \end{aligned} \quad 4.15$$

jednačina (4.14) se može prostije napisati na sledeći način:

$$\begin{aligned} EG^{\alpha\beta}(\vec{q}) + \sum_{r\gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} \langle S_m^r \rangle G^{\gamma\beta}(\vec{q}) \cdot (J_0 - J'_0 + J_{\vec{q}} + J'_{\vec{q}\gamma}) + \\ + g\mu_B H \sum_{\gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} G^{\gamma\beta}(\vec{q}) = - \frac{1}{2\pi} \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_m^{\gamma} \rangle \quad 4.16 \end{aligned}$$

Ako u (4.16) uvedemo oznake $\alpha_{\vec{q}} = J_0 - J_{\vec{q}}$ i $\beta_{\vec{q}\gamma} = J'_0 - J'_{\vec{q}\gamma}$ dobija se sledeća, još jednostavnija jednačina:

$$\begin{aligned} EG^{\alpha\beta}(\vec{q}) + \sum_{r\gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} \langle S_m^r \rangle G^{\gamma\beta}(\vec{q}) (\alpha_{\vec{q}} + \beta_{\vec{q}\gamma}) + \\ + g\mu_B H \sum_{\gamma} i \epsilon_{\alpha r \gamma} G^{\gamma\beta}(\vec{q}) = - \frac{1}{2\pi} \sum_{\gamma} \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S_m^{\gamma} \rangle \quad 4.17 \end{aligned}$$

Jednačina (4.17) se može pisati u matričnom obliku:

$$\hat{T}(\vec{q}, E) \hat{G}(\vec{q}, E) = \hat{C}(\vec{q}) \quad 4.18$$

Matrični elementi matrice $\hat{T}(\vec{q}, E)$ dati su izrazom:

$$T^{\alpha\gamma}(\vec{q}, E) = E\delta_{\alpha, \gamma} + i q \mu_B H \sum_r \epsilon_{\alpha r \gamma} \vec{e}_r + i \sum_r \epsilon_{\alpha r \gamma} \langle S_m^r \rangle (\alpha_q - \beta_{qr}) \quad 4.19$$

Matrica $\hat{T}(\vec{q}, E)$ je zavisna po E zbog člana $E\delta_{\alpha, \gamma}$ i može se napisati na sledeći način:

$$\hat{T}(\vec{q}, E) = \begin{pmatrix} E & -i[q\mu_B H + \langle S^z \rangle (\alpha_q - \beta_{qy})] & i\langle S^y \rangle (\alpha_q - \beta_{qz}) \\ i[q\mu_B H + \langle S^z \rangle (\alpha_q - \beta_{qx})] & E & -i\langle S^x \rangle (\alpha_q - \beta_{qz}) \\ -i\langle S^y \rangle (\alpha_q - \beta_{qx}) & i\langle S^x \rangle (\alpha_q - \beta_{qy}) & E \end{pmatrix} \quad 4.20$$

Matrični element $C^{\alpha\beta}(\vec{q})$ dat je izrazom:

$$C^{\alpha\beta}(\vec{q}) = -\frac{1}{2\pi} \sum_\gamma \epsilon_{\alpha\beta\gamma} \langle S^\gamma \rangle \quad 4.21$$

Matrica $\hat{C}(\vec{q})$ biće sledećeg oblika:

$$\hat{C}(\vec{q}) = \frac{1}{2\pi} \begin{pmatrix} 0 & -\langle S^z \rangle & \langle S^y \rangle \\ \langle S^z \rangle & 0 & -\langle S^x \rangle \\ -\langle S^y \rangle & \langle S^x \rangle & 0 \end{pmatrix} \quad 4.22$$

Iz simetrije hamiltonijana (3.3) sledi da je $\langle S^x \rangle = \langle S^y \rangle$ tako da će izrazi (4.20) i (4.22) biti znatno jednostavniji. Za dalji račun potrebno je odrediti Green-ovu funkciju $\hat{G}(\vec{q}, E)$ a da bi se odredila Green-ova funkcija potrebno je jednačinu

(4.18) pomnožiti sa $\hat{T}^{-1}(\vec{q}, E)$. S leve strane jednačine ostane Green-ova funkcija a s desne strane matični proizvod inverzne matrice $\hat{T}^{-1}(\vec{q}, E)$ i matrica $\hat{C}(\vec{q})$, jednačina (4.23)

$$\hat{G}(\vec{q}, E) = \hat{T}^{-1}(\vec{q}, E) \hat{C}(\vec{q}) \quad 4.23$$

Matrica $\hat{T}^{-1}(\vec{q}, E)$ dobija se po formuli (4.24) gde je $\hat{T}^*(\vec{q}, E)$ adjungovana matrica a $\det \hat{T}(\vec{q}, E)$ je determinanta matrice $\hat{T}(\vec{q}, E)$.

$$\hat{T}^{-1}(\vec{q}, E) = \frac{\hat{T}^*(\vec{q}, E)}{\det \hat{T}(\vec{q}, E)} \quad 4.24$$

Za slučaj kad je $\det \hat{T}(\vec{q}, E) = 0$ dobijaju se polovi Green-ove funkcije koji određuju energiju elementarnih eksitacija.
Ako uvedemo oznaku:

$$\alpha_{\vec{q}} = \beta_{qr} = \lambda_r \quad ; \quad (r=x, y, z) \quad 4.25$$

i ako nam je spoljašnje polje $\vec{H} = 0$ dobijamo sledeći izraz za determinantu matrice $\hat{T}(\vec{q}, E)$:

$$\det \hat{T}(\vec{q}, E) = E^3 - E [\langle S^x \rangle^2 (\lambda_x + \lambda_y) \lambda_z + \langle S^z \rangle^2 \lambda_x \lambda_y] \neq 0 \quad 4.26$$

Polove Green-ove funkcije dobijamo izjednačavanjem gornjeg izraza sa nulom.

$$E_1 = 0 \quad 4.27$$

$$E_{2,3} = \pm [\langle S^x \rangle^2 (\lambda_x + \lambda_y) \lambda_z + \langle S^z \rangle^2 \lambda_x \lambda_y]^{1/2} \quad 4.28$$

Ako polove E_2 i E_3 obeležimo sa E_q tada $\det \hat{T}(\vec{q}, E)$ možemo izraziti u sledećem obliku:

$$\det \hat{T}(\vec{q}, E) = E^3 - E_q^2 E$$

4.29

Matrica $\hat{T}(\vec{q}, E)$ za $|\vec{H}| = 0$ data je izrazom

$$T(q, E) = \begin{pmatrix} E & -i \langle S^z \rangle \lambda_y & i \langle S^y \rangle \lambda_z \\ i \langle S^z \rangle \lambda_x & E & -i \langle S^x \rangle \lambda_z \\ -i \langle S^y \rangle \lambda_x & i \langle S^x \rangle \lambda_y & E \end{pmatrix} \quad 4.30$$

Da bi se odredila inverzna matrica $\hat{T}^{-1}(\vec{q}, E)$ potrebno je potražiti adjungovanu matricu, koja se računa preko kofaktora, i podeliti je sa $\det \hat{T}(\vec{q}, E) \neq 0$.

Adjungovana matrica je data izrazom:

$$T^*(q, E) = \begin{pmatrix} E^2 - \langle S^x \rangle^2 \lambda_z \lambda_y & iE \langle S^z \rangle \lambda_y - \langle S^x \rangle \langle S^y \rangle \lambda_y \lambda_z & -iE \langle S^y \rangle \lambda_z - \langle S^x \rangle \langle S^z \rangle \lambda_y \lambda_z \\ iE \langle S^z \rangle \lambda_x - \langle S^x \rangle \langle S^y \rangle \lambda_x \lambda_z & E^2 - \langle S^y \rangle \lambda_x \lambda_z & iE \langle S^x \rangle \lambda_z - \langle S^y \rangle \langle S^z \rangle \lambda_x \lambda_z \\ iE \langle S^y \rangle \lambda_x - \langle S^x \rangle \langle S^z \rangle \lambda_x \lambda_y & -iE \langle S^x \rangle \lambda_y - \langle S^y \rangle \langle S^z \rangle \lambda_x \lambda_y & E^2 - \langle S^z \rangle^2 \lambda_x \lambda_y \end{pmatrix}$$

Množenjem matrica $\hat{T}^{-1}(\vec{q}, E)$ i $\hat{T}(\vec{q}, E)$ dobija se jedinična matrica, što je dokaz da je račun tačan.

Green-ova funkcija se računa pomoću jednačine:

$$\hat{G}(\vec{q}, E) = \frac{\hat{T}^*(\vec{q}, E) \cdot \hat{C}(\vec{q})}{\det \hat{T}(\vec{q}, E)} \quad 4.32$$

Dobijena matrica $\hat{G}(\vec{q}, E)$ data je izrazom:

$$\hat{C}(\vec{q}, E) = \frac{1}{2\pi(E^2 - E_q^2)} \begin{pmatrix} i[\langle S^z \rangle^2 \lambda_y + \langle S^x \rangle^2 \lambda_z] - [\langle S^z \rangle E + i \langle S^x \rangle^2 \lambda_z] & \langle S^x \rangle E - i \langle S^x \rangle \langle S^z \rangle \lambda_y \\ \langle S^z \rangle E - i \langle S^x \rangle^2 \lambda_z & i[\langle S^z \rangle^2 \lambda_x + \langle S^x \rangle^2 \lambda_z] - [\langle S^x \rangle E + i \langle S^x \rangle \langle S^z \rangle \lambda_x] \\ - [\langle S^x \rangle E + i \langle S^x \rangle \langle S^z \rangle \lambda_y] & \langle S^x \rangle E - i \langle S^x \rangle \langle S^z \rangle \lambda_x & i[\langle S^x \rangle^2 \lambda_x + \langle S^x \rangle^2 \lambda_y] \end{pmatrix}$$



Green-ova funkcija $\hat{G}(\vec{q}, E)$ izražava se preko Green-ovih funkcija $\hat{G}^{\alpha\beta}(\vec{q}, E)$ na sledeći način:

$$\hat{G}(\vec{q}, E) = \begin{pmatrix} G_{xx} & G_{xy} & G_{xz} \\ G_{yx} & G_{yy} & G_{yz} \\ G_{zx} & G_{zy} & G_{zz} \end{pmatrix} \quad 4.34$$

Iz jednačine (4.34) i (4.33) za funkciju $G^{xx}(q, E)$ dobijamo

$$\hat{G}^{xx}(\vec{q}, E) = \frac{1}{2\pi} \cdot \frac{<\mathbf{S}^z>^2 \lambda_y + <\mathbf{S}^x>^2 \lambda_z}{2E_q} \left[-\frac{1}{E+E_q} - \frac{1}{E-E_q} \right] \quad 4.35$$

Spektralna intenzivnost $I^{xx}(\vec{q}, E)$ računamo po opštoj formuli:

$$I^{xx}(\vec{q}, E) = 2\operatorname{Re}[G^{xx}(\vec{q}, E)] \frac{1}{e^{E/\theta} - 1} \quad 4.36$$

Da bi odredili realni deo Green-ove funkcije koristimo sledeću relaciju iz kompleksne analize:

$$\left(\frac{1}{x \pm i\delta} \right)_{\delta \rightarrow 0} = \frac{1}{x} + i\pi\delta(x), \quad 4.37$$

koja daje

$$\frac{1}{E + E_q + i\delta} = \frac{1}{E + E_q} - i\pi\delta(E + E_q) \quad 4.38a$$

$$\frac{1}{E - E_q + i\delta} = \frac{1}{E - E_q} - i\pi\delta(E - E_q) \quad 4.38b$$

Iz relacija (4.38), (4.36) i (4.35) za spektralnu intenzivnost $I^{xx}(\vec{q}, E)$ dobijamo

$$I^{xx}(\vec{q}, E) = - \frac{\langle S^z \rangle^2 \lambda_y + \langle S^x \rangle^2 \lambda_z}{2E_q} [\delta(E+E_q) - \delta(E-E_q)] \frac{1}{e^{E/\theta} - 1} \quad 4.39$$

Srednja vrednost $\langle S_m^x \cdot S_n^x \rangle$ računa se po sledećoj formuli:

$$\langle S_m^x \cdot S_n^x \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} I^{xx}(\vec{q}, E) e^{-i\vec{q}(\vec{m}-\vec{n})} dE \quad 4.40$$

Ako u (4.40) stavimo $\vec{m}=\vec{n}$, s obzirom da je $\langle S_n^x \rangle = \frac{1}{4}$ dobijamo:

$$\frac{1}{4} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \int_{-\infty}^{+\infty} - \frac{\langle S^z \rangle^2 \lambda_y + \langle S^x \rangle^2 \lambda_z}{2E_q} [\delta(E+E_q) - \delta(E-E_q)] \frac{1}{e^{E/\theta} - 1} \quad 4.41$$

Nakon integracije jednačina (4.41) dobija sledeći oblik:

$$\frac{1}{4} = \frac{1}{2N} \sum_{\vec{q}} \frac{\langle S^z \rangle^2 \lambda_y + \langle S^x \rangle^2 \lambda_z}{E_q} \left(\frac{1}{e^{E_q/\theta} - 1} + \frac{1}{e^{-E_q/\theta} - 1} \right) \quad 4.42$$

Izraz u zagradi možemo posle kraćih transformacija svesti na $\operatorname{cth} E_q / 2\theta$ tako da dobijamo konačno

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\langle S^x \rangle^2 \lambda_z + \langle S^z \rangle^2 \lambda_y}{E_q} \operatorname{cth} \frac{E_q}{2\theta} \quad 4.43a$$

Analognim postupcima možemo odrediti Green-ove funkcije $G^{yy}(\vec{q}, E)$, $G^{zz}(\vec{q}, E)$ i odgovarajuće spektralne intenzivnosti $I^{yy}(\vec{q}, E)$, $I^{zz}(\vec{q}, E)$, pomoću kojih možemo odrediti srednju vrednost $\langle S_n^y S_m^y \rangle$ odnosno $\langle S_n^z S_m^z \rangle$. Stavljejući u tim izrazima $\vec{n}=\vec{m}$ dobijamo sledeće dve jednačine

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\rightarrow \\ q}} \frac{\langle S^z \rangle^2 \lambda_x + \langle S^x \rangle^2 \lambda_z}{E_q} \operatorname{cth} \frac{E_q}{20} \quad 4.43b$$

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\rightarrow \\ q}} \frac{\langle S^x \rangle^2 \lambda_x + \langle S^y \rangle^2 \lambda_y}{E_q} \operatorname{cth} \frac{E}{20} \quad 4.43c$$

U opštem slučaju iz sistema jednačina (4.43) možemo odrediti srednje vrednosti komponenti spina $\langle S^\alpha \rangle$ odnosno magnetizaciju $\sigma = \frac{\langle S^z \rangle}{S}$, ali je to težak numerički problem. Zbog toga ćemo izračunati magnetizaciju u Tjablikovskoj aproksimaciji tj. $\langle S^x \rangle = \langle S^y \rangle = 0$. U tom slučaju za energiju eksitacije dobijamo:

$$E_q = \langle S^z \rangle \sqrt{\lambda_x \lambda_y} \quad 4.44$$

Dalje, sistem jednačina (4.43) se svodi na jednu jedinu jednačinu

$$\frac{1}{2} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\rightarrow \\ q}} \frac{\langle S^z \rangle^2 \lambda_y}{E_q} \operatorname{cth} \frac{E_q}{20} \quad 4.45$$

Ako u ovoj jednačini zamenimo vrednost E_q iz (4.44) dobija se jednačina koja određuje relativnu magnetizaciju

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{\substack{\rightarrow \\ q}} \frac{\lambda_y}{\sqrt{\lambda_x \lambda_y}} \operatorname{cth} \frac{E_q}{20} \quad 4.46$$

5. ISPITIVANJE FAZNOG PRELAZA

Iz jednačine (4.46) možemo zaključiti da posmatrani feromagnetik u Tjablikovskoj aproksimaciji, trpi fazni prelaz. Naime, ako temperatura 0 teži u beskonačnost, desna strana jednačine (4.46) teži takodje u beskonačnost a to znači da i

leva strana mora postati beskonačna, što je moguće ako σ teži nuli pri nekoj temperaturi θ_c . Ta temperatura ujedno predstavlja tačku faznog prelaza iz feromagnetskog u paramagnetsko stanje.

S obzirom da je u okolini tačke faznog prelaza θ_c , $\sigma = 0$, mi ćemo $\operatorname{cth} E_q/2\theta$ razviti u red i zadržati prva dva člana, koja su dominantna u okolini tačke θ_c

$$\operatorname{cth} x = \sum_{n=0}^{\infty} \frac{2^{2n} \cdot B_{2n} x^{2n-1}}{(2n)!} \quad 5.1$$

B_n su Bernulijevi brojevi ($B_0 = 1$, $B_1 = 1$, $B_2 = \frac{1}{6}$, $B_3 = \frac{-1}{30}$ itd.). Kao što smo rekli, mi ćemo zadržati prva dva člana što daje

$$\operatorname{cth} \frac{E_q}{2\theta} \sim \frac{2\theta}{E_q} + \frac{E_q}{6\theta} \quad 5.2$$

Ako (5.2) zamenimo u (4.46) dobijamo:

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{q} \frac{\lambda_y}{\sqrt{\lambda_x \lambda_y}} \left(\frac{2\theta}{\langle S^z \rangle \sqrt{\lambda_x \lambda_y}} + \frac{\langle S^z \rangle \sqrt{\lambda_x \lambda_y}}{6\theta} \right) \quad 5.3$$

U daljem radu koristićemo sledeći izraz za energiju elementarnih eksitacija:

$$E_q = \sigma \sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2} \quad 5.4$$

Uporedjivanjem relacija (5.4) i (4.25) za ω_q i γ_q dobijamo:

$$\omega_q = J(3 - \sum_{i=1}^3 \cos q_i a) - J' \left[1 - \frac{1}{2} (\cos q_x a + \cos q_y a) \right] \quad 5.5$$

$$\gamma_q = \frac{J'}{4} (\cos q_x a - \cos q_y a) \quad 5.6$$

$$\frac{1}{\sigma} = \frac{1}{N} \sum_{q} \frac{\omega_q}{\sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}} \left(\frac{2\theta}{\sigma \sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}} + \frac{\sigma \sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}}{6\theta} \right) \quad 5.7$$

Sredjivanjem po σ , iz poslednje jednačine, dobija se

$$\sigma^2 \frac{1}{\theta} \cdot \frac{1}{6N} \sum_{\vec{q}} \omega_q = 1 - \theta \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\omega_q}{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2} \quad 5.8$$

Kad se uvedu oznake:

$$C = \frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\omega_q}{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}; \quad C^* = \frac{1}{6N} \sum_{\vec{q}} \omega_q \quad 5.9$$

jednačina (5.8) prelazi u:

$$\sigma^2 \frac{C^*}{\theta} = 1 - \theta \cdot C \quad 5.10$$

Korenovanjem poslednje jednačine dobijamo izraz za relativnu magnetizaciju u blizini faznog prelaza

$$\sigma = [\frac{\theta}{C^*}(1 - \theta C)]^{1/2} \quad 5.11$$

Kirijeva temperatura θ_c je definisana uslovom $\sigma = 0$, što daje $\theta_c = \frac{1}{C}$, tako da za $\theta \approx \theta_c$ konačno dobijamo:

$$\sigma = [\frac{\theta}{C^*}(1 - \frac{\theta}{\theta_c})]^{1/2} \quad 5.12$$

Iz poslednje relacije možemo zaključiti da u Tjablikovskoj ap- roksimaciji dobijamo fazni prelaz druge vrste, sa kritičnim eksponentom $\beta = 1/2$. Kirijeva temperatura θ_c računa se pomoću sledeće jednačine:

$$\theta_c = \frac{1}{\frac{2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\omega_q}{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}} \quad 5.13$$

Da bi se odredilo θ_c potrebno je izračunati $\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\omega_q}{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}$

Ako se predje sa sume na integral po pravilu

$$\frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} F(\vec{q}) = \frac{V}{(2\pi)^3} \frac{1}{N} \int d^3 \vec{q} F(\vec{q}) \quad 5.13$$

za θ_c dobijamo:

$$\theta_c = \frac{1}{2 \left(\frac{a}{2\pi} \right)^3 \int \frac{\omega_q}{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2} d^3 \vec{q}} \quad 5.14$$

Integraljenje se vrši po prvoj **Briluenovoj** zoni, tako da u slučaju proste kubne rešetke sa konstantom a , komponente talasnog vektora $|\vec{q}|$ uzimaju vrednost u intervalu $(-\frac{\pi}{a}; \frac{\pi}{a})$.

Integral u izrazu (5.14) može se rešiti samo numerički. Mi ćemo posmatrati slučaj slabe anizotropije, uvodjenjem parametra $\delta = \frac{J'}{J} \ll 1$. Podintegralnu funkciju razvićemo u red po malom parametru δ i zadržaćemo se na članu linearном po δ .

$$J \frac{\omega_q}{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2} = C_0 + \delta C_1, \quad 5.15$$

gde je

$$C_0 = \frac{1}{3} \frac{2}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \frac{d^3 \vec{x}}{1 - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \cos x_i} \quad 5.16$$

$$C_1 = \frac{2}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{d^3 x}{(3 - \sum_{i=1}^3 \cos x_i)^2} - \frac{2}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{d^3 x \cos x_1}{(3 - \sum_{i=1}^3 \cos x_i)^2} \quad 5.17$$

$$a x_i = q_i a.$$

Integrali (5.16) i (5.17) računaju se numerički preko modifikovanih Beselovih funkcija. (5.16) se svodi na poznati Watson-ov integral koji glasi:

$$W = \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\pi}^{\pi} \frac{d^3x}{1 - \frac{1}{3} \sum_{i=1}^3 \cos x_i} = 1,51638 \quad 5.18$$

C_1 u jednačini (5.17) može se napisati kao:

$$C_1 = 2(K_0 - K_1) \quad 5.19$$

gde je

$$K_0 = \int_0^{\infty} t \cdot e^{-3t} I_0^3(t) dt \quad 5.20$$

$$K_1 = \int_0^{\infty} t \cdot e^{-3t} I_0^2(t) I_1(t) dt \quad 5.21$$

i

$$I_n(t) = \sum_{K=0}^{\infty} \frac{1}{K! (K+n)!} \left(\frac{t}{2}\right)^{2K+n} \quad 5.22$$

$I_n(t)$ predstavlja modifikovanu Beselovu funkciju.

Numerička integracija daje: $K_0 - K_1 = 0,16$, odnosno

$$C_1 = 0,32 \quad 5.23$$

C_0 se dobija kao $\frac{2}{3}W$ i iznosi

$$C_0 = 1,0109 \quad 5.24$$

I konačno za Kirijevu temperaturu feromagneta sa slabom anizotropijom ($\delta \ll 1$) dobijamo sledeći izraz

$$\frac{\theta_c}{J} = \frac{1}{1,0109 + 0,32\delta} \quad 5.25$$

S obzirom da je Kirijeva temperatura izotropnog feromagnetika data izrazom $\Theta_c/J = 1/C_0$ vidimo da se u slučaju anizotropije Kirijeva tačka snižava.

6. SPINSKA DEVIJACIJA NA $\Theta = 0$

Koristeći izraz (4.46) i relaciju

$$\frac{\lambda_y}{\sqrt{\lambda_x \lambda_y}} = \frac{2\omega_q}{2\sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}} \quad 6.1$$

za $\Theta = 0$ K dobija se za relativnu magnetizaciju σ_0^E ($\text{cth} \frac{q}{2\Theta} = 1$) sledeći izraz:

$$\frac{1}{\sigma_0^E} = \frac{1}{N} \sum_q \frac{\omega_q}{\sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}} \quad 6.2$$

Iz izraza (6.2) sledi:

$$\sigma_0^E = \frac{1}{\frac{1}{N} \sum_q \frac{\omega_q}{\sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}}} \quad 6.3$$

Razvijanjem izraza pod znakom sume po malom parametru δ , dobija se:

$$\frac{\omega_q}{\sqrt{\omega_q^2 + 4\gamma_q^2}} \sim 1 + \frac{\delta^2}{2} \cdot \frac{\eta_q^2}{(\alpha_q^+)^2} \quad 6.4$$

gde je $\eta_q = \frac{1}{4}(\cos q_x a - \cos q_y a)$, $\alpha_q^+ = 2J(3 - \sum_{i=1}^3 \cos q_i a)$
Zbog (6.4) izraz (6.3) može se napisati kao:

$$\sigma_0 = \frac{1}{1 + \frac{1}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\eta^2}{(\alpha \vec{q})^2} \delta^2} \quad 6.5$$

Ako napišemo σ_0 u obliku $\sigma_0 = 1 - \Delta\sigma_0$, koristeći relaciju:

$$\frac{1}{1+x} \approx 1-x \quad (x \ll 1) \quad 6.6$$

i jednačinu (6.5), za devijaciju magnetizacije $\Delta\sigma_0$ (spinska devijacija), s tačnošću do δ^2 , dobijamo

$$\Delta\sigma_0 = \frac{\delta^2}{N} \sum_{\vec{q}} \frac{\eta^2}{(\alpha \vec{q})^2} \quad 6.7$$

Suma u (6.7) može se izraziti preko integrala

$$\frac{1}{16} \sum_{\vec{q}} \frac{(\cos q_x a - \cos q_y a)^2}{(3 - \sum_i \cos q_i a)^2} = \frac{1}{16} \frac{1}{(2\pi)^3} \iiint_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} \frac{(\cos q_x a - \cos q_y a)^2}{(3 - \sum_i \cos q_i a)^2} d^3 \vec{q} \quad 6.8$$

Poslednji integral se može izračunati preko sledeća dva integrala K_2 i K_3 , koji su definisani jednačinama:

$$K_2 = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{\cos^2 x_1}{(3 - \sum_i \cos x_i)^2} d^3 \vec{x} = \int_0^\infty t e^{-3t} I_0^2(t) \frac{t}{dt} I(t) \quad 6.9$$

$$K_3 = \frac{1}{\pi^3} \iiint_0^{\pi} \frac{\cos x_1 \cos x_2}{(3 - \sum_i \cos x_i)^2} d^3 \vec{x} = \int_0^\infty t e^{-t} I_0(t) [e^{-t} I_1(t)]^2 dt \quad 6.10$$

Kao i ranije, $I_n(t)$ su modifikovane Besselove funkcije. Kad se izračunaju integrali (6.9) i (6.10) dobija se da je njihova razlika $K_2 - K_3 = 0,17$. Konačno, za spinsku devijaciju

na $\Theta = 0$ K, dobijamo

$$\Delta\sigma_0 = \frac{\delta^2}{16}(K_2 - K_3) \approx 0,01\delta^2 \quad 6.11$$

U radu [10] izračunata je spinska devijacija za isti feromagnet pomoću Dyson-ove reprezentacije spinskih talasa. Rezultat koji je dobijen u tom radu kvalitativno se slaže sa relacijom (6.11) ali brojne vrednosti se razlikuju (dobije se oko šest puta veća devijacija). Napomenimo da se gornji rezultat u potpunosti slaže sa rezultatom iz rada [2], koji je dobijen dijagonalizacijom ekvivalentnog bozonskog hamiltonijana.

7. ZAKLJUČAK

U ovom radu razmatrane su neke karakteristike jednog modela anizotropnog feromagnetičara koji je predložen u radu [2]. Metodom dvovremenskih, temperaturskih, komutatorskih Green-ovih funkcija, za spinske operatore dobijen je spektar elementarnih eksitacija u anizotropnom feromagnetu. Žbog komplikovanosti računa, prilikom izračunavanja korišćena je Tjablikovska aproksimacija tj., uzeto je $\langle s^x \rangle = \langle s^y \rangle = 0$. U toj aproksimaciji dobijen je izraz koji definiše relativnu magnetizaciju $\sigma = \frac{\langle s^z \rangle}{s}$ u funkciji temperature. Pokazano je dalje, da u dатој aproksimaciji dolazi do faznog prelaza iz feromagnete u paramagnetu fazu. Kirijeva temperatura Θ_c izračunata je s tačnošću do člana linearног по parametru anizotropije $\delta = J'/J$, i pokazuje se da opada sa povećanjem anizotropije.

U poslednjem poglavljiju izračunata je spinska devijacija na $\Theta = 0$ K. Pokazano je da ona teži nuli proporcionalno kvadratu parametra anizotropije, tj. $\Delta\sigma_0 \sim \delta^2$. Ovaj rezultat je u saglasnosti sa rezultatima u radovima [2] i [10].

LITERATURA

- | 1 | Д. Маттис, Теория магнетизма
- | 2 | E. Beloritzky, R. Casalegno and P. Fries,
Phys.Stat.Sol., (b) 77, 495(1976) ✓
- | 3 | B. Tošić, Statistička fizika
- | 4 | Ch. Kittel, Uvod u fiziku čvrstog stanja
- | 5 | D.M. Ivanović, Kvantna mehanika
- | 6 | И.В. Савальев, Основы теоретической физики (Том 2)
- | 7 | П.В. Елютин, В.Д. Кривченков, Квантовая механика
- | 8 | Z.D. Kuzmanović, Diplomski rad (1980)
- | 9 | V. Sajfert, Diplomski rad (1977)
- | 10 | M.J. Škrinjar, D.V. Kapor and J.P. Šetrajčić,
Phys.Stat.Sol., (b) 103, 559(1981)

