

*UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO – MATEMATIČKI FAKULTET
INSTITUT ZA FIZIKU*

УНИВЕРЗИТЕТ У НОВОМ САДУ
ПРИРОДНО-МАТЕМАТИЧКИ ФАКУЛТЕТ

ПРИМЉЕНО:	- 2 XII 1998
ОРГАНИЗ ЈЕД:	Б Р О Ј
0603	9/314

**NUMERIČKA ANALIZA MAGNETIZACIJE U
POLUBESKONAČNOM FEROMAGNETU U APROKSIMACIJI
SREDNJEG POLJA**
– Diplomski rad –

Kandidat: Lidija Josić

Mentor: Dr. Mario Škrinjar

NOVI SAD, DECEMBER 1998

SADRŽAJ

UVOD	1
1. FEROMAGNET SA BIKVADRATNOM INTERAKCIJOM IZMENE I FAZNI PRELAZI	2
1.1. BESKONAČAN FEROMAGNET	2
1.1.1. Ising–ov model	4
1.1.2. Izotropni model	7
1.1.3. Kubni model	8
1.2. POLUBESKONAČAN FEROMAGNET	11
2. NUMERIČKO IZRAČUNAVANJE MAGNETIZACIJE I KVADRUPOLNOG MOMENTA POLUBESKONAČNOG FEROMAGNETA	21
2.1. FEROMAGNETNO UREĐENJE	21
2.2. FEROKVADRUPOLNO UREĐENJE	23
ZAKLJUČAK	41
LITERATURA	42
PRILOG	43

UVOD

Razvoj tehnologije, naročito računarske opreme, doprineo je sve većem interesovanju za magnetizam na površinama i tankim filmovima. Razvijeno je više analitičkih teorijskih metoda, među prvima metod molekulskog (srednjeg) polja, koji je primenjen u ovom radu.

Cilj ovog diplomskog rada je analitičko i numeričko ispitivanje magnetizacije i kvadrupolnog momenta kod polubeskonačnog Heisenberg – ovog feromagneta sa bikvadratnom interakcijom i spinom $S=1$, u aproksimaciji molekulskog polja.

U prvom poglavlju ovog rada opisan je Hamiltonian sa bikvadratnom interakcijom za beskonačan i polubeskonačan feromagnet i analizirani su parametri sistema – magnetizacija i kvadrupolni momenti.

U drugom poglavlju dati su rezultati numeričkog rešavanja sistema nelinearnih diferencnih jednačina za magnetizaciju i kvadrupolni moment, kao i rezultati numeričkog izračunavanja magnetizacije u blizini tačke faznog prelaza u zapremini, kod polubeskonačnog feromagneta za slučaj feromagnetskog uređenja. Takođe je numerički rešen sistem nelinearnih diferencnih jednačina za kvadrupolne momente kao i kvadrupolni moment u zapremini za ferokvadrupolnu fazu.

Programi napisani u programskom paketu *Mathematica* 2.0 for Windows, koji računaju magnetizaciju i kvadrupolne momente dati su u prilogu.

1. FEROMAGNET SA BIKVADRATNOM INTERAKCIJOM IZMENE I FAZNI PRELAZI

Osnovna karakteristika feromagneta je pojava magnetnog momenta i u odsustvu primjenjenog magnetnog polja. Magnetni moment potiče od uređenosti sopstvenih magnetnih momenata elektrona. Ova uređenost je posledica interakcije izmene koja deluje među elektronima. Interakcija izmene je elektrostatičkog porekla, a javlja se usled identičnosti čestica. Pored ove interakcije, u feromagneticima postoje magnetne interakcije sopstvenih magnetnih momenata međusobno i sa lokalnim elektrostatičkim poljem u kristalu. Obe ove interakcije su relativističke prirode, pa su po veličini zanemarljive u odnosu na interakciju izmene. One određuju pravac orijentacije spinova, odnosno, pravac kome odgovara minimum energije sistema.[1]

Bikvadratna interakcija izmene opisuje se spiskim operatorima višeg reda. Neke karakteristike magnetnih sistema, posebno kod jedinjenja retkih zemalja, pokazale su da je uticaj bikvadratne interakcije na moguće magnetno uređenje i fazne prelaze uporediv sa uticajem bilinearne interakcije.

1.1 BESKONAČAN FEROMAGNET

Prvo se analizira beskonačan Heisenberg–ov feromagnet sa prostom kubnom strukturom, bilinearnom (J'_{ij}) i bikvadratnom (K'_{ij}) interakcijom izmene i spinom $S=1$, sledeći uglavnom rad [2].

Hamiltonian ovakvog sistema može se pisati u formi:

$$\hat{H} = -\sum_{ij} \left(\sum_{\ell=x,y,z} J'_{ij} \hat{S}'_i \hat{S}'_j + \sum_{\ell=0,2,xy,yz,xz} K'_{ij} \hat{Q}'_i \hat{Q}'_j \right) \quad (1.1)$$

gde su:

$\hat{S}^x, \hat{S}^y, \hat{S}^z$ dipolni momenti,

a $\hat{Q}^0 = 3(\hat{S}^z)^2 - 2$, $\hat{Q}^2 = (\hat{S}^x)^2 - (\hat{S}^y)^2$, $\hat{Q}^{xy} = \hat{S}^x \hat{S}^y + \hat{S}^y \hat{S}^x$ kvadrupolni momenti sistema.

U toku daljeg rada analiza sistema se vrši u aproksimaciji molekulskog (srednjeg) polja, u kojoj se interakcija među spinovima svodi na interakciju jednog spina sa srednjim poljem ostalih spinova. U obzir se uzimaju samo najbliži susedi.

Imajući u vidu translacionu invarijantnost kristala, Hamiltonian dat jednačinom (1.1) za slučaj interakcije jednog jona, u aproksimaciji molekulskog polja dobija oblik:

$$\hat{H}_0 = -I \left(\sum_{\ell=x,y,z} \alpha' \langle \hat{S}' \rangle \hat{S}' + \sum_{\ell=0,2,xy,yz,xz} \beta' \langle \hat{Q}' \rangle \hat{Q}' \right) \quad (1.2)$$

gde su:

$$I\alpha' = \sum_j J'_{ij}, \quad I\beta' = \sum_j K'_{ij}, \quad \beta_0 = \frac{1}{3}$$

Slobodna energija sistema je:

$$F = -kT \ln Z_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle \quad (1.3)$$

gde je Z_0 statistička suma data kao:

$$Z_0 = \text{Tr} \exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{kT}\right) \quad (1.4)$$

Član $\frac{1}{2} \hat{H}_0$ je unutrašnja energija sistema po jonu koja je funkcija dipolnih i kvadrupolnih momenta, pa mora biti uključena u izraz za slobodnu energiju. Prema tome, konačan izraz za Hamiltonian u aproksimaciji molekulskog polja je:

$$\hat{H}_{MF} = \hat{H}_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle \quad (1.5)$$

Srednje vrednosti dipolnih i kvadrupolnih momenta $\langle \hat{S}' \rangle$ i $\langle \hat{Q}' \rangle$ određuju se iz uslova minimuma slobodne energije:

$$\frac{\partial F}{\partial \langle \hat{S}' \rangle} = \frac{\partial F}{\partial \langle \hat{Q}' \rangle} = 0 \quad (1.6)$$

Iz uslova (1.6) dobijaju se jednačine:

$$\begin{aligned} \langle \hat{S}' \rangle &= \frac{kT}{I\alpha'} \frac{\partial \ln Z_0}{\partial \langle \hat{S}' \rangle} \\ \langle \hat{Q}' \rangle &= \frac{kT}{I\beta'} \frac{\partial \ln Z_0}{\partial \langle \hat{Q}' \rangle} \end{aligned} \quad (1.7)$$

koje mogu imati više rešenja. Rešenje koje odgovara minimumu slobodne energije opisuje ravnotežno stanje sistema.

U aproksimaciji molekulskog polja na temperaturi $T=0^0 K$, sistem se nalazi u čistom stanju. Talasna funkcija sistema je oblika:

$$\psi = a|1\rangle + b|0\rangle + c|-1\rangle \quad (1.8)$$

Poznato je da su fazni prelazi uslovljeni uređenjem dipolnih momenata. Prisustvo kvadrupolnih momenata može dovesti i do dodatnih faznih prelaza. Za pozitivne vrednosti bilinearne ($I\alpha'$) i bikvadratne ($I\beta'$) konsante izmene, dipolni i kvadrupolni momenti jona teže da se urede duž određenog pravca.

Pokazano je da sistemi sa Ising-ovom, izotropnom i kubnom simetrijom imaju, u pravcu uređivanja, iste termodinamičke osobine. Oni poseduju samo jednu tačku faznog prelaza u zavisnosti od parametara sistema: ili se dipolni i kvadrupolni momenti uređuju istovremeno, pa se javlja prelaz iz paramagnetne u feromagnetnu fazu, ili se dipolni momenti ne uređuju, pa se vrši prelaz iz paramagnetne u

ferokvadrupolnu fazu. Sistemi sa aksijalnom simetrijom imaju dva odvojena fazna prelaza. Prvo se uređuju kvadrupolni momenti, a zatim dipolni na nižoj temperaturi.

1.1.1 Ising–ov model

Ising–ova simetrija podrazumeva sledeće srednje vrednosti dipolnih i kvadrupolnih momenata:

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \sigma, \quad \langle \hat{S}^x \rangle = \langle \hat{S}^y \rangle = 0 \\ \langle \hat{Q}^0 \rangle = q_0, \quad \langle \hat{Q}^2 \rangle = \langle \hat{Q}^{xy} \rangle = \langle \hat{Q}^{yz} \rangle = \langle \hat{Q}^{xz} \rangle = 0$$

gde je $\langle \hat{S}^z \rangle = \sigma$ magnetni moment po jonu, odnosno magnetizacija.

Hamiltonian sa Ising–ovom simetrijom u aproksimaciji molekulskog polja je oblika:

$$\hat{H}_0 = -I \left(\alpha \sigma \hat{S}^z + \frac{1}{3} q_0 \hat{Q}^0 \right). \quad (1.9)$$

Za statističku sumu se dobija izraz:

$$Z_0 = Tr \exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{kT}\right) = \exp\left(\frac{q_0 K}{3}\right) \left(\exp(-q_0 K) + 2 \cosh(K\alpha\sigma) \right) \quad (1.10)$$

pa je slobodna energija sistema:

$$\frac{F}{I} = -\frac{1}{K} \ln Z_0 + \frac{1}{2} \alpha \sigma^2 + \frac{1}{6} (q_0)^2 \quad (1.11)$$

gde je $K = I/kT$.

Iz uslova za minimum slobodne energije dobijaju se jednačine:

$$\sigma = \frac{2 \sinh(K\alpha\sigma)}{\exp(-q_0 K) + 2 \cosh(K\alpha\sigma)} \quad (1.12)$$

$$q_0 = 1 - \frac{3 \exp(-q_0 K)}{\exp(-q_0 K) + 2 \cosh(K\alpha\sigma)}$$

Pošto je statistička suma parna funkcija po σ , rešenja $\langle \hat{S}^z \rangle = \pm |\sigma|$ imaju iste osobine pa se može smatrati da je $\sigma > 0$.

Sistem jednačina (1.12) ima tri rešenja:

1. $\sigma \neq 0, q_0 \neq 0$
2. $\sigma = 0, q_0 \neq 0$
3. $\sigma = 0, q_0 = 0$

U zavisnosti od vrednosti α , rešenja kojima odgovara minimalna vrednost slobodne energije su sledeća:

1.) za $\alpha > 1$ rešenje $\sigma > q_0 > 0$ ima najnižu energiju.

Na niskim temperaturama σ i q_0 su aproksimativno:

$$\begin{aligned}\sigma &= 1 - \exp(-K(\alpha + 1)) \\ q_0 &= 1 - 3\exp(-K(\alpha + 1))\end{aligned}\tag{1.13}$$

Na temperaturama u blizini tačke faznog prelaza ($T < T_c$) magnetizacija je mala ($\sigma \ll 1$), pa se može koristiti razvoj:

$$\frac{k}{I}(T_c - T) = A\sigma + B\sigma^2 + \dots\tag{1.14}$$

Eliminacijom q_0 iz jednačina (1.12) i razvojem rezultujućeg izraza po σ , za konstante A i B dobijaju se vrednosti $A = 0$ i $B = \alpha(\alpha - 2)/4(\alpha - 1)$. Izrazi za magnetizaciju i kvadrupolni moment su u ovom slučaju:

$$\begin{aligned}\sigma &= \sqrt{\frac{4(\alpha - 1)k(T_c - T)}{\alpha(\alpha - 2)I}} \\ q_0 &= \frac{3}{(\alpha - 2)} \frac{k}{I}(T_c - T)\end{aligned}\tag{1.15}$$

Iz gornjih jednačina se vidi da za $\alpha > 2$ postoji fazni prelaz druge vrste iz paramagnetne u feromagnetnu fazu i sistem se ponaša kao uobičajeni Izingov model sa temperaturom faznog prelaza $kT_c/I = \alpha S(S+1)/3 = 2\alpha/3$. Za $\alpha < 2$ javlja se fazni prelaz prve vrste iz paramagnetne u feromagnetnu fazu na temperaturi $kT/I > 2\alpha/3$.

U faznom dijagramu (sl.1.1.1), tačka sa koordinatama ($\alpha=2, kT/I = 4/3$) je trikritična tačka.

2.) za $\alpha < 1$ i $\frac{kT}{I} < \frac{1}{\ln 4} = 0.72$ rešenje $\sigma = 0, q_0 < 0$ ima najnižu slobodnu energiju, a za $\alpha < 1$ i $\frac{kT}{I} > \frac{1}{\ln 4} = 0.72$ rešenje $\sigma = 0, q_0 = 0$.

Za utvrđivanje tipa faznog prelaza definiše se pozitivna funkcija $Q(kT/I)$:

$$Q\left(\frac{kT}{I}\right) = \begin{cases} -\frac{1}{2}\bar{q}_0 & \text{za } \frac{kT}{I} < \frac{1}{\ln 4} \\ -\frac{1}{2}\bar{q}_0 & \text{za } \frac{kT_Q}{I} = \frac{1}{\ln 4} \\ 0 & \text{za } \frac{kT}{I} > \frac{1}{\ln 4} \end{cases}\tag{1.16}$$

gde je $\bar{q}_0 < 0$ rešenje q_0 jednačina (1.12) za $\alpha = 0$, a T_Q temperatura faznog prelaza.

Na niskim temperaturama funkcija $Q(kT/I)$ je oblika:

$$Q\left(\frac{kT}{I}\right) = 1 - 3 \exp\left(-\frac{2I}{kT}\right) \quad (1.17)$$

dok je u blizini tačke faznog prelaza T_Q :

$$Q\left(\frac{kT}{I}\right) = \frac{1}{2} + \frac{(\ln 4)^2 k}{(3 - 2 \ln 4) I} (T_Q - T) \quad (1.18)$$

Na $T = 0^0 K$ jednačina (1.17) daje $Q = 1$, a na $T = T_Q$ se iz jednačine (1.18) dobija $Q = 1/2$, pa su vrednosti kvadrupolnog momenta \bar{q}_0 :

$$\bar{q}_0 = \begin{cases} -2 & \text{za } T = 0^0 K \\ -1 & \text{za } T = T_Q \\ 0 & \text{za } T > T_Q \end{cases} \quad (1.19)$$

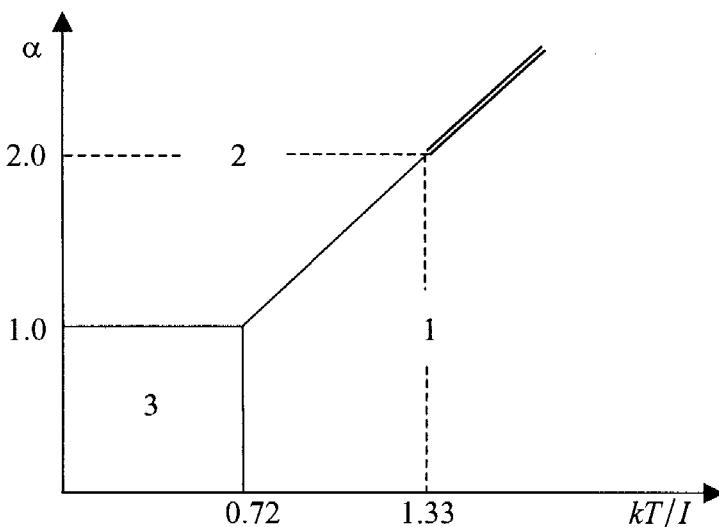
Može se zaključiti da je $kT_Q/I = 1/\ln 4$ temperatura faznog prelaza prve vrste iz paramagnete u ferokvadrupolnu fazu.

3.) za $\alpha = 1$ postoje dva rešenja sa istom minimalnom vrednošću slobodne energije:

1. $\sigma = q_0 = Q\left(\frac{kT}{I}\right)$
2. $\sigma = 0, q_0 = -2 Q\left(\frac{kT}{I}\right)$

Oba rešenja postoje na svim temperaturama $T < T_Q$.

Fazni dijagram koji opisuje Ising-ov Hamiltonijan prikazan je na slici 1.1.1. Oblast 1 odgovara paramagnetskoj fazi, oblast 2 feromagnetskoj, a oblast 3 ferokvadrupolnoj fazi. Na jednostrukim linijama se javljaju fazni prelazi prve vrste, a na dvostrukoj fazni prelaz druge vrste.



(sl.1.1.1.1)

1.1.2 Izotropni model

U analizi sistema sa izotropnom simetrijom, za osu uređivanja dipola može se izabrati z–osa, pa su srednje vrednosti dipolnih i kvadrupolnih momenata:

$$\langle \hat{S}^z \rangle = \sigma, \quad \langle \hat{S}^x \rangle = \langle \hat{S}^y \rangle = 0 \\ \langle \hat{Q}^{xy} \rangle = \langle \hat{Q}^{yz} \rangle = \langle \hat{Q}^{xz} \rangle = 0$$

Hamiltonian sa izotropnom simetrijom je oblika:

$$\hat{H} = -\sum_{ij} \left(J_{ij} \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j + K_{ij} (\hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j)^2 \right) \quad (1.20)$$

a u aproksimaciji molekulskog polja:

$$\hat{H}_0 = -I \left(\alpha \sigma \hat{S}^z + q_2 \hat{Q}^2 + \frac{1}{3} q_0 \hat{Q}^0 \right) \quad (1.21)$$

gde su $I = \frac{1}{2} \sum_j K_{jj}$, $(\alpha + 1)I = \sum_j J_{jj}$, $q_2 = \langle \hat{Q}^2 \rangle$ i $q_0 = \langle \hat{Q}^0 \rangle$.

Za statističku sumu se dobija izraz:

$$Z_0 = \text{Tr} \exp\left(-\frac{\hat{H}_0}{kT}\right) = \exp\left(\frac{q_0 K}{3}\right) \left(\exp(-q_0 K) + 2 \cosh(K \sqrt{q_2^2 + \alpha^2 \sigma^2}) \right) \quad (1.22)$$

pa je slobodna energija sistema:

$$\frac{F}{I} = -\frac{1}{K} \ln Z_0 + \frac{\alpha}{2} \sigma^2 + \frac{1}{2} (q_2)^2 + \frac{1}{6} (q_0)^2 \quad . \quad (1.23)$$

Uslov minimuma slobodne energije:

$$\frac{\partial F}{\partial \sigma} = \frac{\partial F}{\partial q_2} = 0$$

daje jednakost:

$$(\alpha - 1)\sigma q_2 = 0 \quad (1.24)$$

Analizom gornje jednačine dobijaju se sledeći rezultati:

1.) za $\alpha \neq 1$ postoje tri rešenja:

1. $\sigma \neq 0, q_2 = 0$
2. $\sigma = 0, q_2 \neq 0$
3. $\sigma = 0, q_2 = 0$

Za $q_2 = 0$, Hamiltonian dat jednačinom (1.21) prelazi u Ising–ov Hamiltonijan, pa se razmatra samo rešenje sa $q_2 \neq 0$.

Za $\sigma = 0$ i $q_2 \neq 0$ jednačine za q_2 i q_0 su:

$$q_2 = \frac{2 \sinh(Kq_2)}{\exp(-q_0 K) + 2 \cosh(Kq_2)} \quad (1.25)$$

$$q_0 = 1 - \frac{3 \exp(-q_0 K)}{\exp(-q_0 K) + 2 \cosh(Kq_2)}$$

Gornji sistem jednačina prelazi u sistem (1.12) za $\alpha = 1$ i $\sigma \rightarrow q_2$. Iz analize Ising–ovog Hamiltonijana je poznato da u slučaju $\alpha = 1$ postoje dva degenerisana rešenja, pa su rešenja sistema (1.25):

1. $q_2 = q_0 = Q\left(\frac{kT}{I}\right)$
2. $q_2 = 0, q_0 = -2Q\left(\frac{kT}{I}\right)$

Ova dva rešenja su ekvivalentna, pošto rotacija koja prevodi y u z osu transformiše rešenje $q_2 = q_0 = Q(kT/I)$ u rešenje $q_2 = 0, q_0 = -2Q(kT/I)$. Prema tome, uvek se mogu izabrati takve koordinate da je $q_0 \neq 0$ i $\sigma \neq 0$.

Može se zaključiti, da za $\alpha \neq 1$ izotropni Hamiltonian ima iste osobine kao i Ising–ov: za $\alpha > 1$ dipoli i kvadrupoli se uređuju istovremeno, dok se za $\alpha < 1$ dipoli ne uređuju. Jedina razlika između Ising–ovog i izotropnog modela je u tome što se kod izotropnog modela dipoli i kvadrupoli mogu uređivati u bilo kom pravcu, dok se kod Ising–ovog modela oni uređuju samo duž z–ose.

2.) za $\alpha = 1$, σ i q_2 se ne mogu odrediti jednoznačno, ali su povezani relacijom:

$$\sqrt{\sigma^2 + q_2^2} = q_0 = Q\left(\frac{kT}{I}\right).$$

Ovo rešenje ima istu slobodnu energiju kao i rešenje:

$$\sigma = q_2 = 0, \quad q_0 = -2Q\left(\frac{kT}{I}\right).$$

1.1.3 Kubni model

U aproksimaciji molekulskog polja Hamiltonian sa kubnom simetrijom je oblika:

$$\hat{H}_0 = -I \left(\alpha \vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{S}} + \beta \hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(0)} \right) \quad (1.26)$$

gde su:

$$\hat{H}^{(0)} = q_2 \hat{Q}^2 + \frac{1}{3} q_0 \hat{Q}^0$$

$$\hat{H}^{(1)} = q_{xy} \hat{Q}^{xy} + q_{yz} \hat{Q}^{yz} + q_{xz} \hat{Q}^{xz}$$

$$\sigma_i = \langle \hat{S}^i \rangle \quad i=x,y,z$$

$$q_0 = \langle \hat{Q}^0 \rangle, q_2 = \langle \hat{Q}^2 \rangle, q_{ij} = \langle \hat{Q}^{ij} \rangle \quad i \neq j \quad i,j=x,y,z .$$

U zavisnosti od vrednosti β , za kubni Hamiltonian se dobijaju sledeći rezultati:

1.) za $\beta=0$, kubni Hamiltonian (1.26) prelazi u izotropni (1.21). Iz analize date u delu 1.1.2 je poznato da se za $\alpha>1$ dipolni i kvadrupolni momenti uređuju duž jedne od ivica elementarne celije, dok se za $\alpha<1$ uređuju samo kvadrupolni momenti q_0 .

2.) za $\beta>>1$, kubni Hamiltonian (1.26) prelazi u Hamiltonian oblika:

$$\hat{H}_0 = -I(\alpha\bar{\sigma} \cdot \vec{S} + \beta\hat{H}^{(0)}) \quad (1.27)$$

koji ima dva stabilna stanja.

1. Za $\alpha<\beta$ rešenje sa najnižom slobodnom energijom je:

$$\sigma = q_2 = q_0 = 0$$

$$q_{xy} = q_{yx} = q_{xz} = -\frac{2}{3}Q\left(\frac{kT}{I\beta}\right)$$

pa se sistem nalazi u ferokvadrupolnoj fazi sa osom simetrije koja je paralelna pravcu [111].

2. za $\alpha>\beta$ rešenje sa najnižom slobodnom energijom je:

$$q_2 = q_0 = 0$$

$$\sigma_x = \sigma_y = \sigma_z = \sigma/\sqrt{3}$$

$$q_{xy} = q_{yx} = q_{xz} = q/3$$

i sistem se nalazi u feromagnetnoj fazi sa dipolnim i kvadrupolnim momentima usmerenim duž [111] pravca.

U ovom slučaju q i σ dati su relacijama:

$$\sigma = \frac{2 \sinh(K\alpha\sigma)}{\exp(-q\beta K) + 2 \cosh(K\alpha\sigma)} \quad (1.28)$$

$$q = 1 - \frac{3 \exp(-q\beta K)}{\exp(-q\beta K) + 2 \cosh(K\alpha\sigma)}$$

Ako se uvedu smene $K\beta \rightarrow K'$ i $\alpha/\beta \rightarrow \alpha'$ sistem jednačina (1.28) prelazi u sistem (1.12). Prema tome, Hamiltonian opisan jednačinom (1.27) ima iste karakteristike kao Ising-ov Hamiltonian sa bilinearnom i bikvadratnom konstantom interakcije $I\alpha$ i $I\beta/3$. Jedina razlika je u tome što se kod Ising-ovog Hamiltonijana uređivanje vrši duž z-ose.

3.) za $\beta > 1$, Hamiltonian (1.26) pogodno je napisati u obliku:

$$\hat{H}_0 = -I(\hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(0)}) - I(\alpha\bar{\sigma} \cdot \hat{S} + (\beta-1)\hat{H}^{(0)}) \quad (1.29)$$

pa su sve konstante $I, \alpha, \beta - 1$ pozitivne. Prvi član u gornjem Hamiltonijanu je sferno-simetričan i ne podrazumeva ni jedan pravac uređivanja. Pravac uređivanja određen je drugim članom. Iz prethodnog razmatranja je poznato da drugi član podrazumeva uređivanje duž [111] pravca. Kada se sistem uređuje duž [111] pravca $q_2 = q_0 = 0$, pa je i $\hat{H}^{(0)} = 0$. Može se zaključiti da za $\beta > 1$ kubni Hamiltonijan prelazi u Hamiltonijan (1.27) za slučaj $\beta >> 1$.

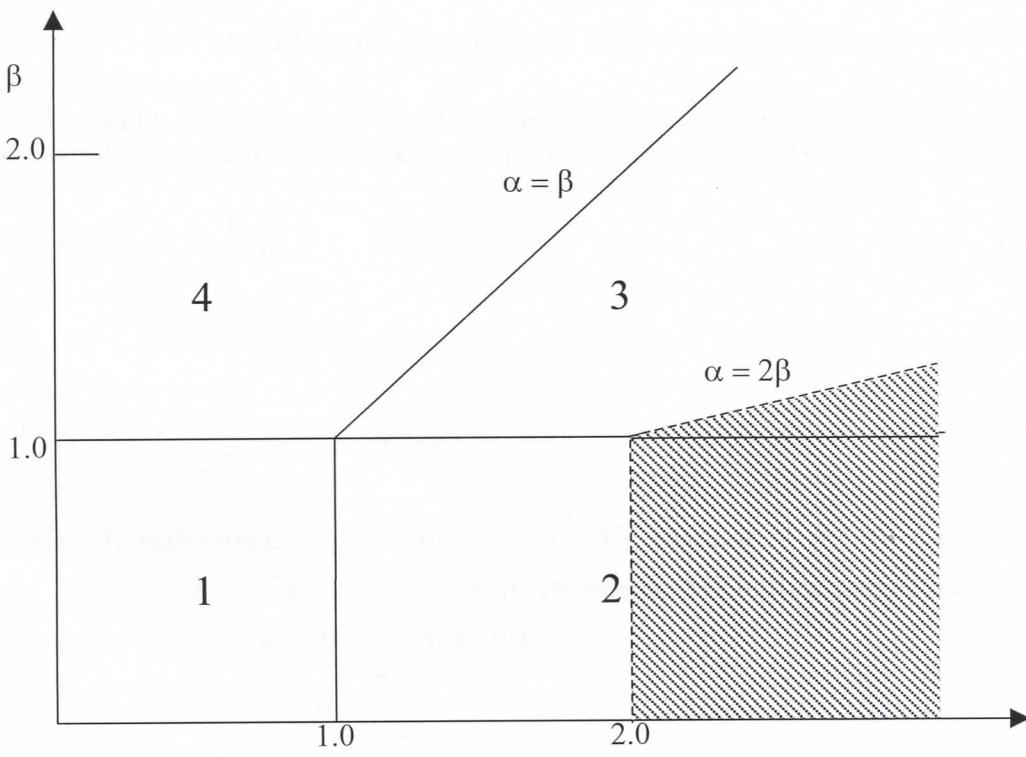
4.) za $\beta < 1$, kubni Hamiltonijan je pogodno napisati u obliku:

$$\hat{H}_0 = -I\beta(\hat{H}^{(1)} + \hat{H}^{(0)}) - I(\alpha\vec{\sigma} \cdot \hat{\vec{S}} + (1-\beta)\hat{H}^{(0)}) \quad (1.30)$$

pa su konstante $I\beta, I\alpha, I(1-\beta)$ pozitivne. Pošto je prvi član sferno-simetričan, pravac uređivanja je određen drugim članom koji podrazumeva uređivanje duž [100] pravca. Prema tome, za $\beta < 1$ su $q_{xy} = q_{yz} = q_{xz} = 0$ i kubni Hamiltonijan prelazi u izotropni Hamiltonijan dat jednačinom (1.21).

Može se zaključiti da se kubni Hamiltonijan uređuje ili duž [111] ili duž [100] pravca. Sistem može imati istovremeno i dipolno i kvadrupolno uređenje ili se javlja samo kvadrupolno uređenje.

Na slici 1.1.2. prikazani su tipovi uređenja sistema za različite vrednosti α i β . Oblasti 1 i 4 odgovaraju ferokvadrupolnoj fazi, a 2 i 3 feromagnetskoj. Momenti se uređuju duž [100] pravca u oblastima 1 i 2, dok se u oblastima 3 i 4 uređuju duž pravca [111]. Fazni prelazi su drugog reda u šrafiranoj oblasti, a prvog u svim ostalim.



(sl.1.1.2)

1.2 POLUBESKONAČAN FEROMAGNET

Analizira se polubeskonačan Heisenberg–ov feromagnet sa prostom kubnom strukturom, bilinearnom (I_{ij}) i bikvadratnom ($K_{ij} = aI_{ij}$) interakcijom izmene u aproksimaciji najbližih suseda. Za spin $S=1$, analiza se vrši u aproksimaciji molekulskog polja ([3] - [5]).

Posmatrani feromagnet ispunjava deo prostora $z>0$ sa ravni (001) kao graničnom površi.

Hamiltonian ovakvog sistema je oblika:

$$\hat{H} = -\frac{1}{2} \sum_{ij} I_{ij} \hat{\vec{S}}_i \cdot \hat{\vec{S}}_j - \frac{a}{2} \sum_{ij} I_{ij} (\hat{S}_i^z \cdot \hat{S}_j^z)^2 - g\mu_B \alpha \sum_i \hat{S}_i^z \quad (1.31)$$

Uvođenjem kvadrupolnih momenata može se pokazati da gornji Hamiltonian prelazi u Hamiltonian dat jednačinom (1.1).

Veličina I_{ij} u Hamiltonijanu (1.31) je konstanata izmene koja ima vrednost I_s za susede na površini, a vrednost I u svim ostalim slučajevima, dok je veličina α primenjeno magnetno polje usmereno duž z–ose. Ovo polje uvodi Ising–ovu simetriju u Hamiltonijan:

$$\sigma_n = \langle \hat{S}_n^z \rangle, \quad \langle \hat{S}_n^x \rangle = \langle \hat{S}_n^y \rangle = 0$$

$$q_n = \langle \hat{Q}_n^0 \rangle = \langle 3(\hat{S}_n^z)^2 - S(S+1) \rangle, \quad \langle \hat{Q}_n^2 \rangle = \langle \hat{Q}_n^{xy} \rangle = \langle \hat{Q}_n^{yz} \rangle = \langle \hat{Q}_n^{xz} \rangle = 0$$

gde su σ_n i q_n magnetizacija i kvadrupolni moment, veličine karakteristične za svaki sloj feromagneta.

Imajući u vidu Ising–ovu simetriju i translacionu invarijantnost kristala u XY–ravni, Hamiltonian sistema u aproksimaciji molekulskog polja je oblika:

$$\hat{H}_{Mf} = \hat{H}_0 - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle \quad (1.32)$$

gde je

$$\hat{H}_0 = -N_{xy} \sum_{n=1}^N (\bar{\alpha}_n \hat{S}_n^z + \bar{\kappa}_n \hat{Q}_n^0) \quad (1.33)$$

U gornjem Hamiltonijanu N_{xy} je broj čvorova u XY–ravni, a N je broj slojeva u z–pravcu. Veličine $\bar{\alpha}_n$ i $\bar{\kappa}_n$ su srednja polja izmene koja deluju na magnetizaciju σ_n i kvadrupolni moment q_n . Ako se uvedu oznake:

$$\varepsilon = \frac{I_s}{I} \quad \text{i} \quad \alpha = \frac{2-a}{a}$$

$\bar{\alpha}_n$ i $\bar{\kappa}_n$ su oblika:

$$\overline{\chi}_1 = \left(1 - \frac{a}{2}\right) IS_1 \quad \overline{\chi}_{n \geq 2} = \left(1 - \frac{a}{2}\right) IS_n \quad (1.34a)$$

i

$$\overline{\kappa}_1 = \left(\frac{2-a}{6\alpha}\right) IQ_1 \quad \overline{\kappa}_{n \geq 2} = \left(\frac{2-a}{6\alpha}\right) IQ_n \quad (1.34b)$$

gde su:

$$S_1 = 4\varepsilon\sigma_1 + \sigma_2 \quad S_{n \geq 2} = 4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1} \quad (1.35a)$$

$$Q_1 = 4\varepsilon q_1 + q_2 \quad Q_{n \geq 2} = 4q_n + q_{n-1} + q_{n+1} \quad (1.35b)$$

Statistička suma je oblika:

$$Z = \left(\prod_{n=1}^N Z_n\right)^{N_{xy}} \quad (1.36)$$

gde je:

$$Z_n = \sum_{i=-1}^1 \langle i | \exp(-\frac{1}{kT}(\overline{\chi}_n \hat{S}_n^z + \overline{\kappa}_n \hat{Q}_n^0)) | i \rangle$$

pa je slobodna energija sistema:

$$F = -kT \ln Z - \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle = -kTN_{xy} \sum_{n=1}^N \ln Z_n + \frac{N_{xy}}{2} \sum_{n=1}^N (\overline{\chi}_n \sigma_n + \overline{\kappa}_n q_n)$$

Za slobodnu energiju po čvoru XY-ravni, na osnovu prethodne relacije, dobija se izraz:

$$\frac{F}{N_{xy}} = -kT \sum_{n=1}^N \left(\frac{1}{kT} \overline{\chi}_n + \ln \left(\exp\left(-\frac{3}{kT} \overline{\chi}_n\right) + 2 \cosh\left(\frac{1}{kT} \overline{\chi}_n\right) \right) \right) + \frac{1}{2} \sum_{n=1}^N (\overline{\chi}_n \sigma_n + \overline{\kappa}_n q_n) \quad (1.37)$$

Magnetizacija σ_n i kvadrupolni moment q_n određuju se iz uslova minimuma slobodne energije:

$$\frac{\partial F}{\partial \sigma_n} = \frac{\partial F}{\partial q_n} = 0 \quad (1.38)$$

Uslov (1.38) daje sistem jednačina:

$$\sigma_n = \frac{2 \sinh\left(\frac{S_n}{4t}\right)}{\exp\left(-\frac{Q_n}{4\alpha t}\right) + 2 \cosh\left(\frac{S_n}{4t}\right)} \quad (1.39a)$$

$$q_n = \frac{6 \cosh(\frac{S_n}{4t})}{\exp(-\frac{Q_n}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{S_n}{4t})} - 2$$

koji se na osnovu (1.35a) i (1.35b) može napisati u obliku:

za $n = 1$

$$\sigma_1 = \frac{2 \sinh(\frac{4\epsilon\sigma_1 + \sigma_2}{4t})}{\exp(-\frac{4\epsilon q_1 + q_2}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\epsilon\sigma_1 + \sigma_2}{4t})}$$

$$q_1 = \frac{6 \cosh(\frac{4\epsilon\sigma_1 + \sigma_2}{4t})}{\exp(-\frac{4\epsilon q_1 + q_2}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\epsilon\sigma_1 + \sigma_2}{4t})} - 2$$

za $n \geq 2$

(1.39b)

$$\sigma_n = \frac{2 \sinh(\frac{4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1}}{4t})}{\exp(-\frac{4q_n + q_{n-1} + q_{n+1}}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1}}{4t})}$$

$$q_n = \frac{6 \cosh(\frac{4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1}}{4t})}{\exp(-\frac{4q_n + q_{n-1} + q_{n+1}}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1}}{4t})} - 2$$

gde je $t = \frac{kT}{2(2-a)I}$.

Gornji sistem jednačina može se tačno rešiti samo numerički, pa se dalje sistem analizira na $T = 0^0 K$ i na temperaturama u blizini tačke faznog prelaza.

1.) Na $T = 0^0 K$ feromagnet se nalazi u osnovnom stanju sa energijom koja je jednaka minimalnoj vrednosti energije:

$$E_0 = \langle \hat{H}_{MF} \rangle = \frac{1}{2} \langle \hat{H}_0 \rangle = -\frac{N_{xy}}{2} \sum_{n=1}^N (\bar{\chi}_n \sigma_n + \bar{\kappa}_n q_n) . \quad (1.40)$$

Da bi se našla rešenja sistema (1.39a) u ovom slučaju, uspostavlja se veza između prve i druge relacije u (1.39a) :

$$3\sigma_n = (q_n + 2) \tanh\left(\frac{S_n}{4t}\right) \quad (1.41)$$

koja za $T \rightarrow 0^0 K$ prelazi u jednačinu:

$$q_n(0) = 3\sigma_n(0) - 2 \quad (1.42)$$

Rešenja jednačine (1.42) kojima odgovara minimum energije E_0 su:

1. za $\alpha > 1$ $\sigma_n(0) = q_n(0) = 1$, pa se sistem nalazi u feromagnetnoj fazi

i

2. za $\alpha < 1$ $\sigma_n(0) = 0, q_n(0) = -2$, i sistem se nalazi u ferokvadrupolnoj fazi.

Za $\alpha = 1$ oba uređenja imaju istu energiju, pa se javljaju dva degenerisana rešenja.

2.) Na temperaturama u blizini tačke faznog prelaza magnetizacija i kvadrupolni moment teže nuli, pa je moguće naći približno analitičko rešenje sistema (1.39a).

Da bi se izračunala temperatura faznog prelaza u površinskom sloju t_c^* koja se može razlikovati u odnosu na zapreminsку t_c , kao i da bi se našla temperaturna zavisnost magnetizacije i kvadrupolnog momenta u blizini t_c , neophodno je izvršiti dva razvoja sistema jednačina (1.39a). Za temperaturu faznog prelaza u zapremini usvaja se vrednost $t_c = 1$.

Prvo se jednačine (1.39a) linearizuju po članovima σ_n imajući u vidu $q_n \sim \sigma_n^2 = 0$. Kao rezultat se dobija sistem:

$$\begin{aligned} 3\sigma_1 &= \frac{1}{2t} (4\epsilon\sigma_1 + \sigma_2) \\ 3\sigma_{n \geq 2} &= \frac{1}{2t} (4\sigma_n + \sigma_{n-1} + \sigma_{n+1}) \end{aligned} \quad (1.43a)$$

odnosno,
za $n = 1$

$$\begin{aligned} (6t - 4\epsilon)\sigma_1 - \sigma_2 &= 0 \\ \text{za } n \geq 2 \quad -\sigma_{n-1} + (6t - 4)\sigma_n - \sigma_{n+1} &= 0 \end{aligned} \quad (1.43b)$$

Jednačine (1.43b) se mogu pretstaviti u matričnom obliku :

$$(6t\hat{I} - \hat{A})\vec{\sigma} = 0 \quad (1.44)$$

gde su

$$\hat{I} = \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & 1 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \hat{A} = \begin{pmatrix} 4\epsilon & 1 & 0 & 0 & 0 & \dots \\ 1 & 4 & 1 & 0 & 0 & \dots \\ 0 & 1 & 4 & 1 & 0 & \dots \\ 0 & 0 & 1 & 4 & 1 & \dots \\ 0 & 0 & 0 & 1 & 4 & \dots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix} \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \sigma_4 \\ \sigma_5 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad (1.45)$$

U drugom razvoju zadržavaju se članovi koji su srazmerni σ_n^3 i članovi $q_n \sim \sigma_n^2$, pa se dobijaju jednačine:

$$q_n = \frac{Q_n}{6\alpha t} + \frac{3}{4} \left(\frac{S_n}{6t} \right)^2 \quad (1.46)$$

$$\sigma_n \left(1 - \frac{Q_n}{12\alpha t} + \frac{3}{4} \left(\frac{S_n}{6t} \right)^2 \right) = \frac{S_n}{6t} + \frac{3}{8} \left(\frac{S_n}{6t} \right)^3$$

Za temperature $t \approx t_c \approx 1$ važi aproksimacija $q_n \approx q_{n-1} \approx q_{n+1}$ i $\sigma_n \approx \sigma_{n-1} \approx \sigma_{n+1}$, pa jednačine (1.46) prelaze u :

$$q_n = \frac{3\alpha\sigma_n^2}{4t(t\alpha - 1)} \quad (1.47)$$

$$\sigma_n \cdot \left(1 - \frac{q_n}{2\alpha t} + \frac{3}{4} \left(\frac{\sigma_n}{t} \right)^2 \right) = \frac{\sigma_n}{t} + \frac{3}{8} \left(\frac{\sigma_n}{t} \right)^3$$

Za $t \approx t_c \approx 1$ prva jednačina u (1.47) je oblika:

$$q_n = \frac{3\alpha\sigma_n^2}{4(\alpha - 1)} \quad (1.48)$$

Iz poslednje jednakosti se može zaključiti da za:

1. $\alpha > 1$ postoji feromagnetsko uređenje sa $\sigma_n \neq 0$ i $q_n > 0$

- a za
2. $\alpha < 1$ potrebno je koristiti drugi razvoj sa $\sigma_n = 0$ što predstavlja ferokvadrupolno uređenje sa $q_n < 0$.

Kombinacijom prve jednačine u (1.46) sa izrazima (1.35a) i (1.35b), dobija se sistem:

za $n = 1$

$$(x - 4\epsilon)Q_1 - Q_2 = \frac{\alpha}{8t} (4\epsilon S_1^2 + S_2^2) \quad (1.49)$$

za $n > 1$

$$(x - 4)Q_n - Q_{n-1} - Q_{n+1} = \frac{\alpha}{8t} (4S_n^2 + S_{n-1}^2 + S_{n+1}^2)$$

gde je $x = 6\alpha t$.

Ako se uvede matrica:

$$\hat{\Delta} = x\hat{I} - \hat{A} \quad (1.50)$$

a jednačine (1.35a) i (1.35b) napišu u obliku:

$$\vec{Q} = \hat{A} \vec{q} \quad , \quad \vec{S} = \hat{A} \vec{\sigma} \quad (1.51)$$

$$\vec{Q} = \begin{pmatrix} Q_1 \\ Q_2 \\ Q_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \vec{q} = \begin{pmatrix} q_1 \\ q_2 \\ q_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \vec{S} = \begin{pmatrix} S_1 \\ S_2 \\ S_3 \\ \vdots \end{pmatrix} \quad \vec{\sigma} = \begin{pmatrix} \sigma_1 \\ \sigma_2 \\ \sigma_3 \\ \vdots \end{pmatrix}$$

tada se sistem jednačina (1.49) može pretstaviti u matričnoj formi:

$$\hat{\Delta} \vec{Q} = \frac{\alpha}{8t} \hat{A} (\vec{S})^2 \quad , \quad (\vec{S})^2 = \begin{pmatrix} S_1^2 \\ S_2^2 \\ S_3^2 \\ \vdots \end{pmatrix}. \quad (1.52)$$

Jednačina (1.52) se može transformisati na sledeći način:

$$\begin{aligned} \vec{Q} &= \frac{\alpha}{8t} \hat{\Delta}^{-1} \hat{A} (\vec{S})^2 \\ \hat{\Delta} &= \hat{T} + \hat{G} = \hat{T}(\hat{I} + \hat{T}^{-1}\hat{G}) \\ \hat{\Delta} &= \hat{T}\hat{C} \quad , \quad \hat{C} = \hat{I} + \hat{B}\hat{G} \quad , \quad \hat{B} = \hat{T}^{-1} \\ \vec{Q} &= \frac{\alpha}{8t} \hat{C}^{-1} \hat{B} \hat{A} (\vec{S})^2 \end{aligned}$$

Matrice $\hat{G}, \hat{C}, \hat{C}^{-1}$ su oblika:

$$\hat{G} = \begin{pmatrix} \gamma & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ 0 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}, \quad \hat{C} = \begin{pmatrix} C_{11} & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ C_{21} & 1 & 0 & 0 & \cdots \\ C_{31} & 0 & 1 & 0 & \cdots \\ C_{41} & 0 & 0 & 1 & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

$$\hat{C}^{-1} = \frac{1}{C_{11}} \begin{pmatrix} 1 & 0 & 0 & 0 & \cdots \\ -C_{21} & C_{11} & 0 & 0 & \cdots \\ -C_{31} & 0 & C_{11} & 0 & \cdots \\ -C_{41} & 0 & 0 & C_{11} & \cdots \\ \vdots & \vdots & \vdots & \vdots & \ddots \end{pmatrix}$$

sa matričnim elementima:

$$\gamma = 4(1 - \varepsilon) \quad C_{11} = 1 + B_{11}\gamma \quad C_{n1} = B_{n1}\gamma$$

$$i \quad B_{nm} = \frac{y^{n+m} - y^{|m-n|}}{1 - \frac{1}{y}} \quad (1.53)$$

gde je:

$$1 + \frac{1}{y} = x - 4 = 6\alpha t - 4 \quad (1.54)$$

Sada se jednačina (1.52) može napisati u obliku:

$$\bar{Q} = \frac{\alpha}{8t} \hat{C}^{-1} \hat{B} \hat{A} (\vec{S})^2 = \frac{\alpha}{8t} \frac{1}{C_{11}} (\hat{C}^{-1})' \frac{1}{1 - \frac{1}{y}} (\hat{B})' \hat{A} (\vec{S})^2. \quad (1.55)$$

Temperature faznih prelaza određene su singularitetima matrica \hat{C}^{-1} i \hat{B} :

1. singularitet matrice \hat{C}^{-1} određuje se iz uslova:

$$C_{11} = 1 + B_{11}\gamma = 0 \quad (1.56)$$

Pošto je $B_{11} = y$, dobija se pol

$$y_c^s = -\frac{1}{\gamma} \quad (1.57)$$

koji određuje temperaturu faznog prelaza u površinskom sloju t_c^s .

2. singularitet matrice \hat{B} se dobija za:

$$1 - \frac{1}{y_c} = 0 \quad (1.58)$$

i iznosi :

$$y_c = 1 \quad . \quad (1.59)$$

On određuje temperaturu faznog prelaza u zapremini t_c .

Da bi veličina \vec{Q} u izrazu (1.55) bila određena, mora $(\vec{S})^2 \rightarrow 0$, pa se temperature faznih prelaza određuju iz jednačine (1.54) za $\alpha = 1$. Kao rezultati se dobijaju izrazi:

$$t_c^s = \frac{16\epsilon(1-\epsilon)-1}{24(1-\epsilon)} \quad (1.60)$$

$$t_c = 1$$

Iz jednačina (1.60) može se zaključiti:

$$1. \text{ za } \epsilon \leq \frac{5}{4}, \quad t_c^s = t_c$$

i

$$2. \text{ za } \epsilon > \frac{5}{4}, \quad t_c^s > t_c$$

Prema tome, temperatura faznog prelaza u površinskom sloju može biti jednak ili veća od temperaturu faznog prelaza u zapremini, što zavisi od odnosa konstanti izmene u površini i u zapremini kristala ($\epsilon = I_s/I$).

Da bi se našla temperaturna zavisnost magnetizacije i kvadrupolnog momenta u blizini $t \approx t_c = 1$, za slučaj feromagnetskog uređenja ($\alpha > 1$), prepostavlja se rešenje u obliku:

$$\sigma_n = a \tanh((n+b)\Psi) \quad (1.61)$$

$$q_n = \frac{3}{4} \frac{\alpha}{\alpha-1} a^2 \tanh^2((n+b)\Psi)$$

Konstanta a pretstavlja magnetizaciju u zapremini, a dobija se rešavanjem sistema jednačina (1.47). Kao rezultat se dobija izraz:

$$a = \sigma_B = 2 \sqrt{\frac{2}{3}} \sqrt{\frac{\alpha-1}{\alpha-2}} \sqrt{1-t} \quad (1.62)$$

U izvođenju gornjeg izraza izvršena je smena $t \rightarrow t_c = 1$ u članovima koji su linearni po t , a u članovima $\sim t^2$ smena $t^2 \rightarrow t \cdot t_c = t$.

Za $n=1$ i $n=2$ prva jednačina u (1.61) daje relacije:

$$\sigma_1 = a \tanh((1+b)\Psi) \approx a(1+b)\Psi \quad (1.63)$$

$$\sigma_2 = a \tanh((2+b)\Psi) \approx a(2+b)\Psi$$

koje u kombinaciji sa prvom jednačinom sistema (1.43b) za $t_c = 1$ daju vrednost konstante b :

$$b = -\frac{4(1-\varepsilon)}{4(1-\varepsilon)+1} \quad (1.64)$$

Veličina Ψ se dobija zamenom izraza za σ_n i q_n iz (1.61) u drugu jednačinu sistema (1.46). Kao rezultat se dobija izraz:

$$\Psi = \sqrt{3}\sqrt{1-t} \quad (1.65)$$

U izvođenju gornjeg izraza koriste se aproksimacije $\tanh^2((n+b)\Psi) \approx ((n+b)\Psi)^2$ i $\tanh(n+b)\Psi \approx (n+b)\Psi - \frac{((n+b)\Psi)^3}{3}$. Članovi $\sim \Psi^n$ za $n > 2$ se zanemaruju, a u nelinearnim članovima po t uvodi se smena $t \rightarrow t_c = 1$.

Prema tome, približna rešenja sistema (1.39a) na temperaturama u blizini tačke $t_c = 1$ data su relacijama:

$$\begin{aligned} \sigma_n &= 2\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\alpha-1}{\alpha-2}\sqrt{t_c-t}\tanh\left(\left(n-\frac{4(1-\varepsilon)}{4(1-\varepsilon)+1}\right)\sqrt{3}\sqrt{t_c-t}\right) \\ q_n &= 2\frac{\alpha}{\alpha-2}(t_c-t)\tanh^2\left(\left(n-\frac{4(1-\varepsilon)}{4(1-\varepsilon)+1}\right)\sqrt{3}\sqrt{t_c-t}\right) \end{aligned} \quad (1.66)$$

Ako se uvedu smene:

$$t_c = 1, \tau = 1-t, \delta = -\frac{4(1-\varepsilon)}{4(1-\varepsilon)+1} \quad \text{i} \quad \xi = a_0\tau^{-v}$$

gde je ξ korelaciona dužina, jednačine (1.66) dobijaju oblik:

$$\begin{aligned} \sigma_n &= 2\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\alpha-1}{\alpha-2}\tau^\beta \tanh\left(\frac{\sqrt{3}(n+\delta)a_0}{\xi}\right) \\ q_n &= 2\frac{\alpha}{\alpha-2}\tau \tanh^2\left(\frac{\sqrt{3}(n+\delta)a_0}{\xi}\right) \end{aligned} \quad (1.67)$$

Razvojem jednačina (1.67), za $n=1$, mogu se dobiti temperaturne zavisnosti magnetizacije i kvadrupolnog momenta u površinskom sloju. One su date relacijama:

$$\sigma_1 \approx 2\sqrt{\frac{2}{3}}\frac{\alpha-1}{\alpha-2}\tau^\beta \frac{\sqrt{3}(1+\delta)a_0}{\xi} = C_1(\alpha, \varepsilon)\tau^{\beta+v} \approx \tau^{\beta+v} \quad (1.68)$$

$$q_1 \approx 2 \frac{\alpha}{\alpha - 2} \tau \left(\frac{\sqrt{3}(1 + \delta)a_0}{\xi} \right)^2 = C_2(\alpha, \varepsilon) \tau^{2v+1} \approx \tau^{2v+1}$$

U aproksimaciji molekulskog polja, $\beta = v = \frac{1}{2}$. To znači da na temperaturama $t \approx t_c$ površinska magnetizacija linearno zavisi od temperature, a kvadrupolni moment u površinskom sloju kvadratno.

Tačna teorija za koeficijente β i v daje vrednosti $\beta \approx \frac{1}{3}$ i $v \approx \frac{2}{3}$, pa je $\beta + v = 1$ i $2v + 1 = 2$, odnosno daje iste zavisnosti površinske magnetizacije i kvadrupolnog momenta od temperature kao i aproksimacija molekulskog polja.

Potrebno je naglasiti da je linearna zavisnost površinske magnetizacije od temperature potvrđena i eksperimentalno preko magnetnog rasejanja elektrona na antiferomagnetiku NiO (LEED – eksperimenti, rasejanje nisko energetskih elektrona) [6].

Iz sistema (1.67) i (1.68) se može videti da:

1. za $\alpha > 2$ postoji fazni prelaz druge vrste

a

2. za $1 < \alpha < 2$ fazni prelaz prve vrste iz paramagnetske u feromagnetsku fazu.

Za $\alpha = 2$ dobija se trikritična tačka.

Kod Heisenberg–ovog feromagneta sa bilinearnom interakcijom izmene, fazni prelazi iz paramagnetske u feromagnetsku fazu predstavljaju fazne prelaze druge vrste. Iz prethodnog izlaganja može se zaključiti da se uticaj bikvadratne interakcije ogleda u pojavi kako faznih prelaza druge tako i faznih prelaza prve vrste, u zavisnosti od parametra α .

2. NUMERIČKO IZRAČUNAVANJE MAGNETIZACIJE I KVADRUPOLNOG MOMENTA POLUBESKONAČNOG FEROMAGNETA

Programi za izračunavanje magnetizacije i kvadrupolnog momenta napisani su u programskom paketu *Mathematica 2.0 for Windows* ([7] - [10]).

Odabrani parametri programa su:

parametar bikvadratne interakcije a , konstante izmene u površini- I_s i u zapremini- I sistema i broj slojeva sistema n , koji su dati u tabeli 1.

Tabela 1.

ime fajla	a	I_s	I	n
indat1	0.5	1	1	25
indat11	0	1	1	25
indat2	0.5	3	4	25
indat22	0	3	4	25
indat3	0.5	3	5	25
indat33	0	3	5	25
indat4	0.5	3	2	25
indat44	0	3	2	25

Za zapreminsку temperaturu faznog prelaza u feromagnetno uređenje usvaja se vrednost $t_c = 1$, a u ferokvadrupolno uređenje vrednost $t_Q = 2$.

Programi rešavaju:

- a) sistem nelinearnih transcedentnih jednačina za σ_n i q_n i nelinearnu transcedentnu jednačinu za σ_n^A – magnetizaciju u blizini $t_c = 1$ za feromagnetno uređenje
- b) sistem nelinearnih transcedentnih jednačina za q_n i nelinearnu transcedentnu jednačinu za q_B – kvadrupolni moment u zapremini kod ferokvadrupolnog uređenja.

Rezultati izračunavanja dati su u vidu grafika, koji predstavljaju temperaturne zavisnosti magnetizacije i kvadrupolnog momenta.

2.1. FEROMAGNETNO UREĐENJE

Feromagnetno uređenje karakteriše vrednost parametra bikvadratne interakcije

$$a < 1$$

i vrednosti magnetizacije i kvadrupolnog momenta

$$\sigma_n \neq 0, \quad q_n \neq 0,$$

koje su date sistemom jednačina:

$$\begin{aligned}
\sigma_1 &= \frac{2 \sinh(\frac{4\epsilon\sigma_1+\sigma_2}{4t})}{\exp(-\frac{4\epsilon q_1+q_2}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\epsilon\sigma_1+\sigma_2}{4t})} \\
q_1 &= \frac{6 \cosh(\frac{4\epsilon\sigma_1+\sigma_2}{4t})}{\exp(-\frac{4\epsilon q_1+q_2}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\epsilon\sigma_1+\sigma_2}{4t})} - 2 \\
\sigma_n &= \frac{2 \sinh(\frac{4\sigma_n+\sigma_{n-1}+\sigma_{n+1}}{4t})}{\exp(-\frac{4q_n+q_{n-1}+q_{n+1}}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\sigma_n+\sigma_{n-1}+\sigma_{n+1}}{4t})} \\
q_n &= \frac{6 \cosh(\frac{4\sigma_n+\sigma_{n-1}+\sigma_{n+1}}{4t})}{\exp(-\frac{4q_n+q_{n-1}+q_{n+1}}{4\alpha t}) + 2 \cosh(\frac{4\sigma_n+\sigma_{n-1}+\sigma_{n+1}}{4t})} - 2 \quad , \quad n = 2, \dots, 25
\end{aligned} \tag{2.1}$$

~~$q_{26} = q_{25}$~~

gde su $\epsilon = I_s / I$, $\alpha = (2 - a)/a$, $\sigma_{26} = \sigma_{25}$ i $q_{26} = q_{25}$.

Gornji sistem rešen je programom PROGRAM 1.

Odabrane vrednosti parametara programa su:

- $n = 25$
- temperaturni interval $t = \{0.75, 1.02, 0.005\}$, koji daje 55 temperaturnih tačaka, za ulazne fajlove indat1, indat11, indat2, indat22, indat3 i indat33
- temperaturni interval $t = \{0.75, 1.1, 0.007\}$, koji daje 51 temperaturnu tačaku, za ulazne fajlove indat4 i indat44.

PROGRAM 1 rešava sistem (2.1) za svaku temperaturnu tačku Newton – ovom metodom. Za prepostavljenu početnu vrednost $\sigma_0 = q_0 = 1$, ostvaruje se konvergencija metoda u svim slučajevima. PROGRAM 1 dat je u prilogu.

Karakteristike programa:

1. visoki memorijski zahtevi za ispitivanje konvergencije pri proizvoljnom odabiru početnih vrednosti, pa se kao kriterijum konvergencije usvaja odziv *Mathematica*-e
2. relativno kratko vreme računanja ≈ 30 min. na računaru sa 32 Mb RAM-a i procesorom Intel P-133 MHz.

Rezultati izračunavanja dati su na slikama 2.1.1 – 2.1.16.

PROGRAM 2 rešava jednačinu:

$$\sigma_n^4 = 2 \sqrt{\frac{2}{3} \frac{\alpha - 1}{\alpha - 2}} \sqrt{1-t} \tanh\left(n - \frac{4(1-\epsilon)}{4(1-\epsilon)+1}\right) \sqrt{3} \sqrt{1-t} \tag{2.2}$$

Odabrane vrednosti parametara programa su:

- $n = 1, 2, \dots, 25$
- temperaturni interval $t = \{0.9, 1.0, 0.001\}$, koji daje 101 temperaturnu tačku, za ulazne fajlove indat1, indat11, indat2, indat22, indat3 i indat33

PROGRAM 2 kao rezultat izračunavanja daje zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ zajedno sa $\sigma_n = \sigma_n(t)$ iz programa1.

Rezultati izračunavanja dati su na slikama 2.2.1 – 2.2.6, a PROGRAM 2 u prilogu.

2.2. FEROKVADRUPOLNO UREĐENJE

Ferokvadrupolno uređenje karakteriše:

$$a > 1, \quad \sigma_n = 0, \quad q_n < 0.$$

Sistem:

$$q_1 = \frac{6}{\exp(-\frac{4\epsilon q_1 + q_2}{4\alpha t}) + 2} - 2 \quad (2.3)$$

$$q_n = \frac{6}{\exp(-\frac{4q_n + q_{n-1} + q_{n+1}}{4\alpha t}) + 2} - 2 \quad n = 2, \dots, 25$$

gde su $\epsilon = I_s / I$, $\alpha = (2 - a)/a$ $\sigma_{26} = \sigma_{25}$ i $q_{26} = q_{25}$,

i jednačinu:

$$q_B = \frac{6}{\exp(-\frac{3q_B}{2\alpha t}) + 2} - 2 \quad (2.4)$$

rešava program PROGRAM 3.

PROGRAM 3 rešava (2.3) i (2.4) za:

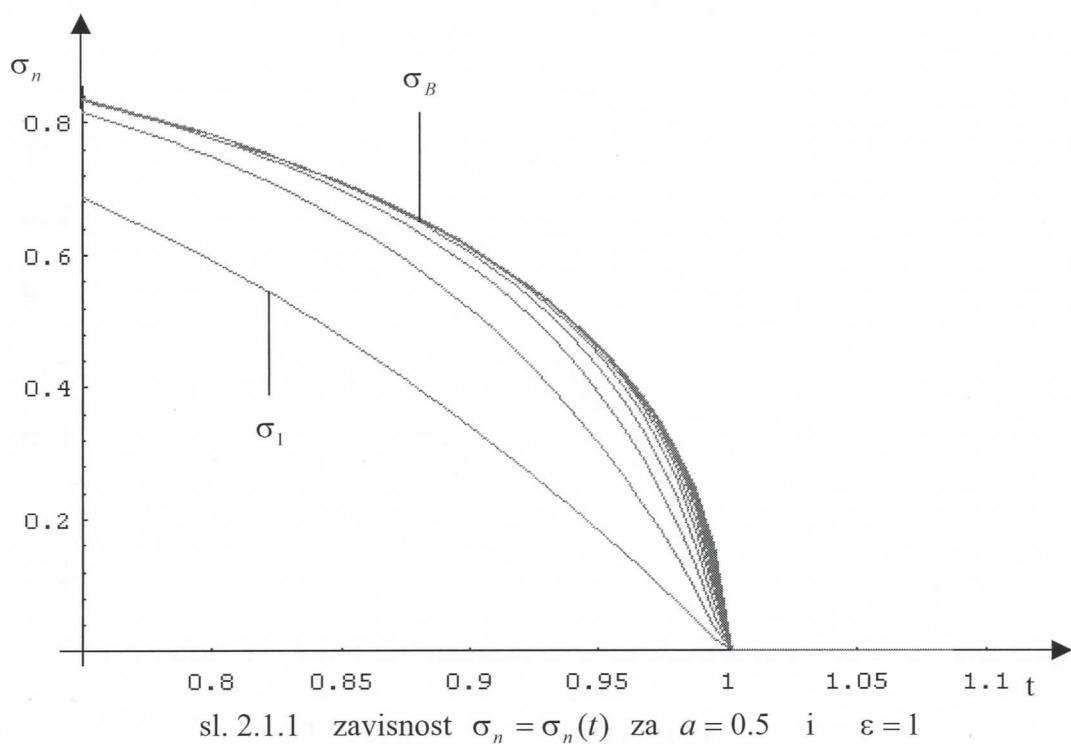
- $n = 25$, $a = 1.298$
- temperaturni interval $t = \{0.1, 2.1, 0.105\}$, koji daje 20 temperaturnih tačaka, za ulazne fajlove indat1, indat2, indat3 i indat4
- interval $\{-2, 0, 0.1\}$ za odabir početnih vrednosti iteracije

Newton – ovom metodom. Iz intervala $\{-2, 0, 0.1\}$ se biraju početne vrednosti za kvadrupolne momente. Prva kombinacija za koju se ostvaruje konvergencija, koristi se kao početna u Newton – ovom metodu. Kao kriterijum konvergencije usvaja se odziv *Matematica-e*

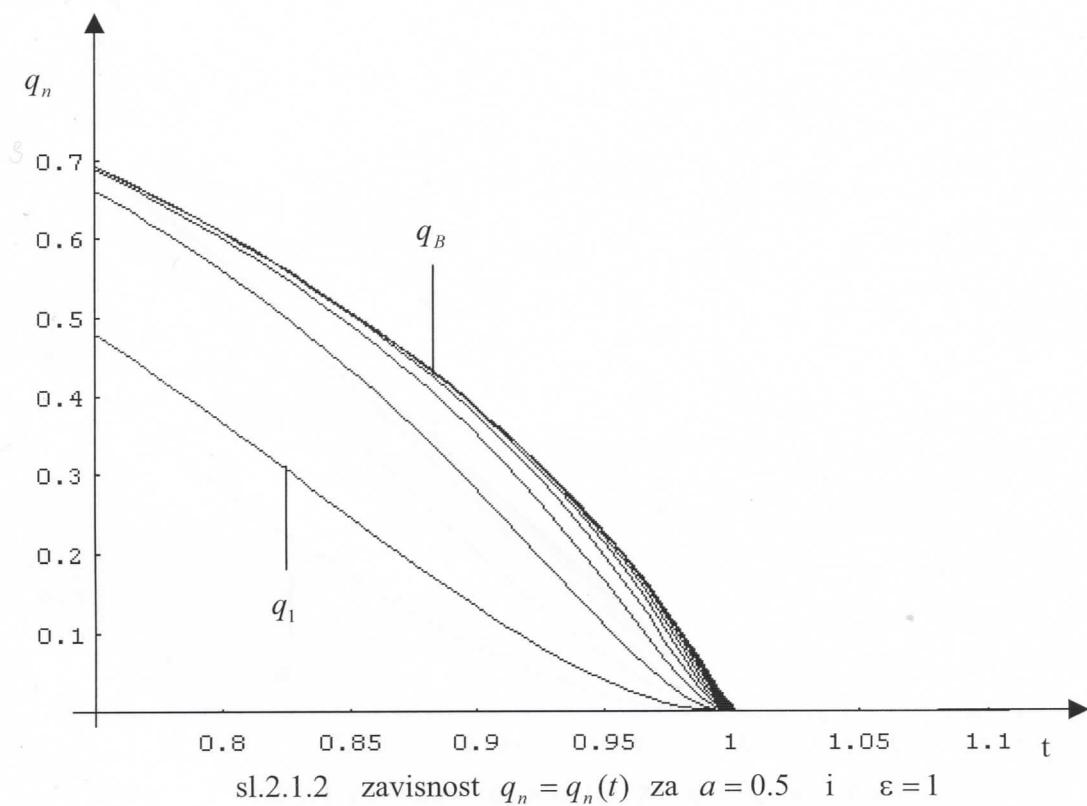
Karakteristike programa:

1. za $n = 25$, vreme izračunavanja se naglo povećava sa povećanjem broja temperaturnih tačaka iznad 20
2. izračunavanje rešenja za prvu kombinaciju početnih vrednosti za koju se konvergencija ostvaruje, usled čega se eventualno postojeća druga rešenja ne nalaze. Ovo je posledica same prirode naredbi Cath i Throw koje se u programu koriste.
3. kratko vreme računanja

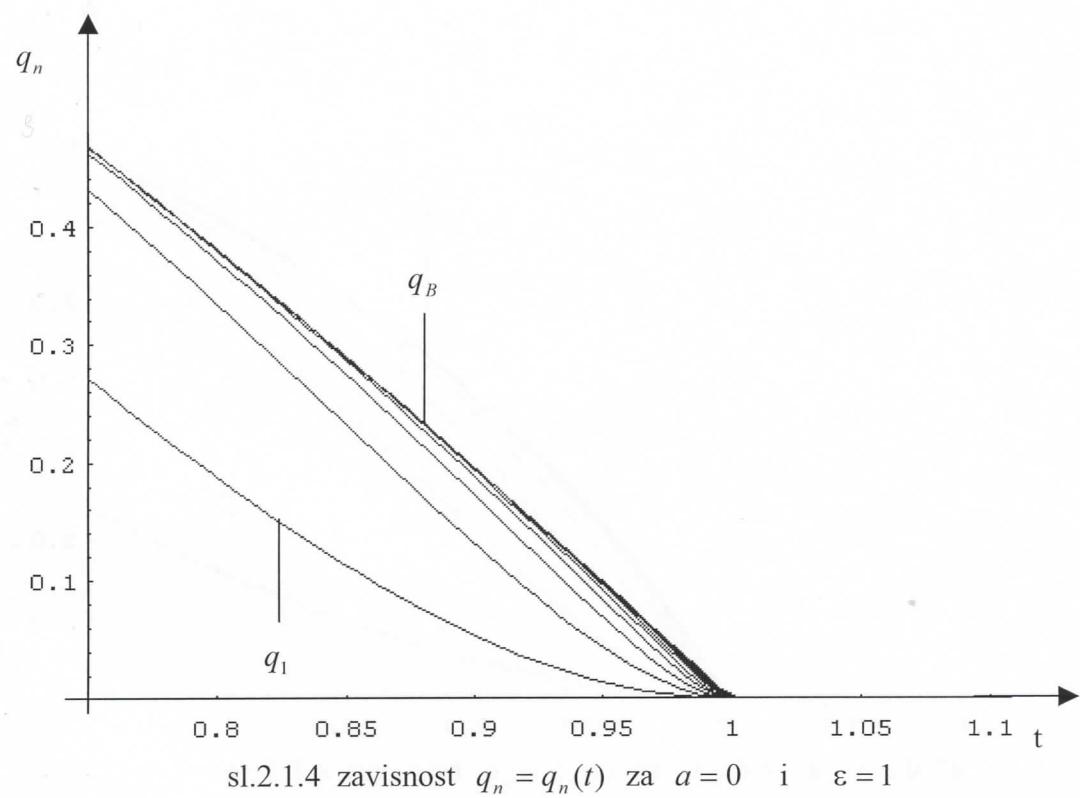
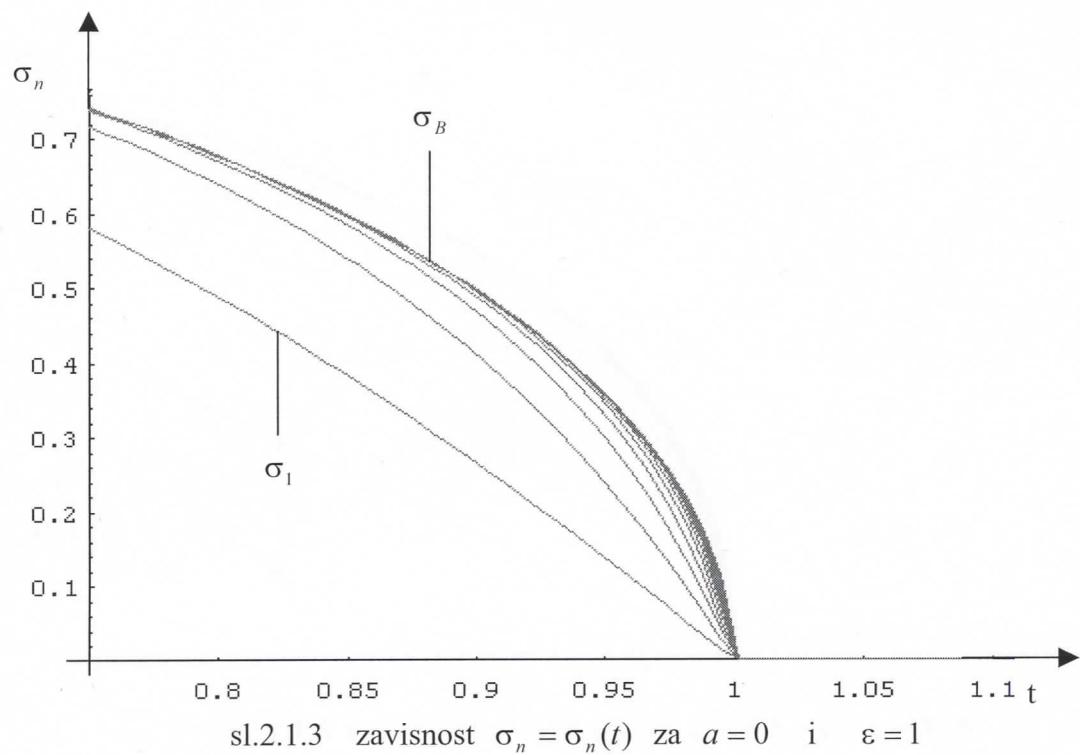
PROGRAM 3 dat je u prilogu, a rezultati izračunavanja na slikama sl.2.3.1 – sl.2.3.8.

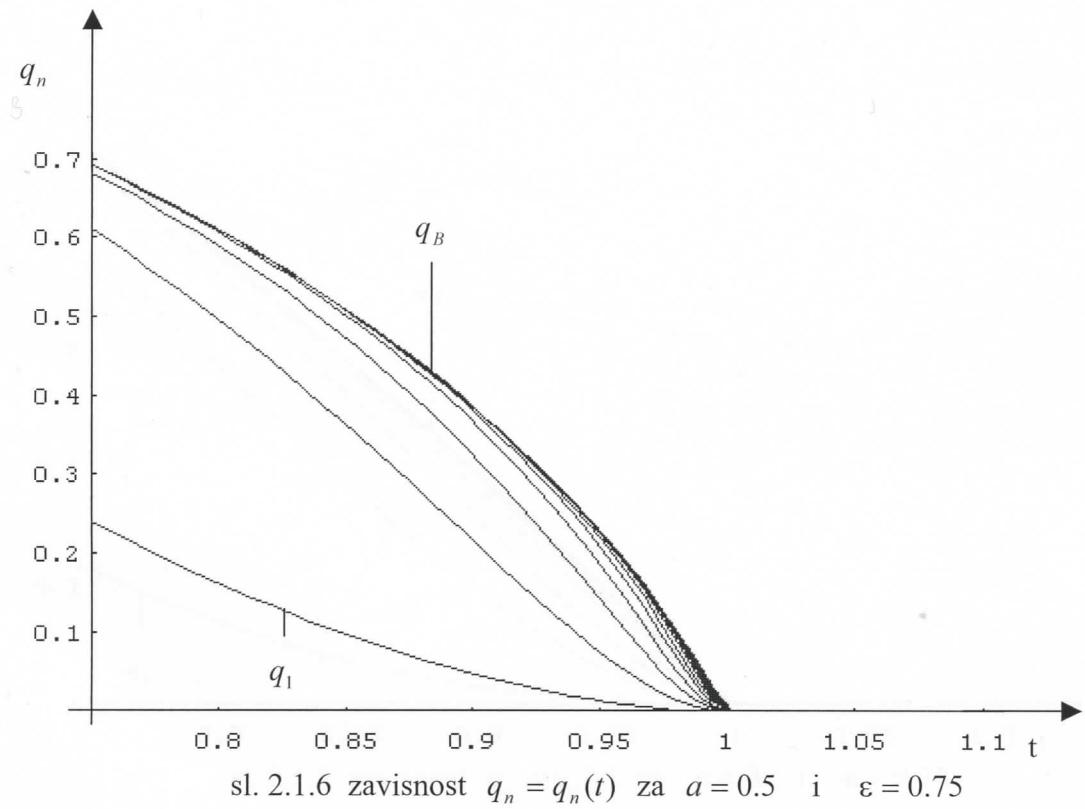
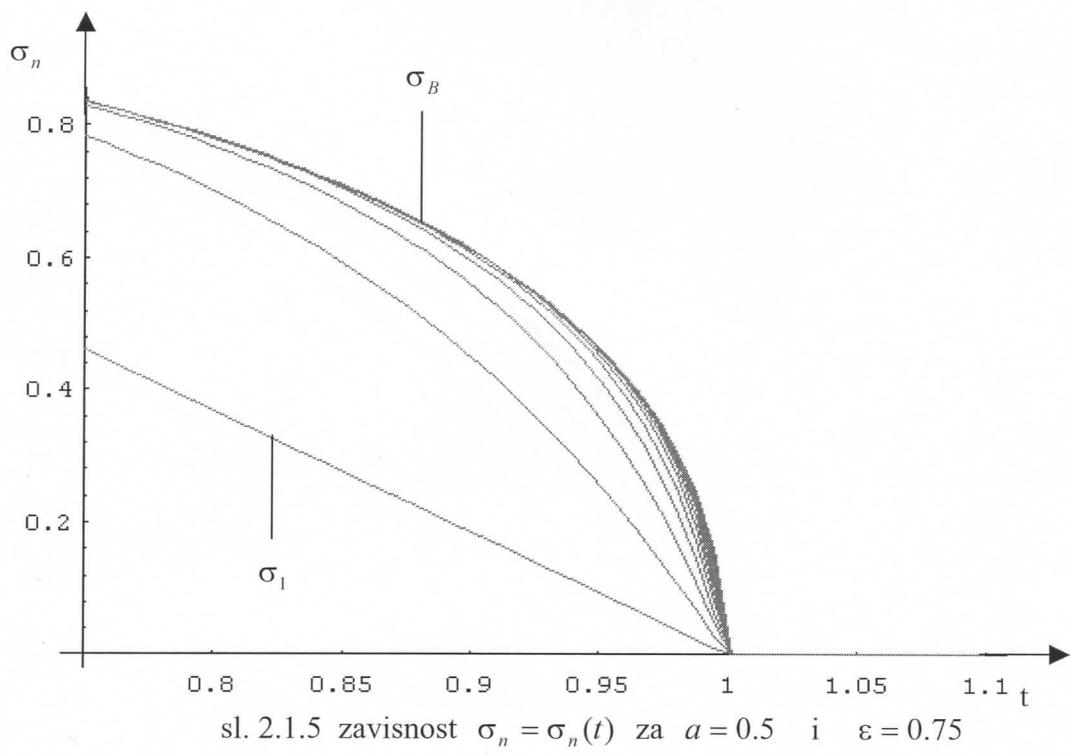


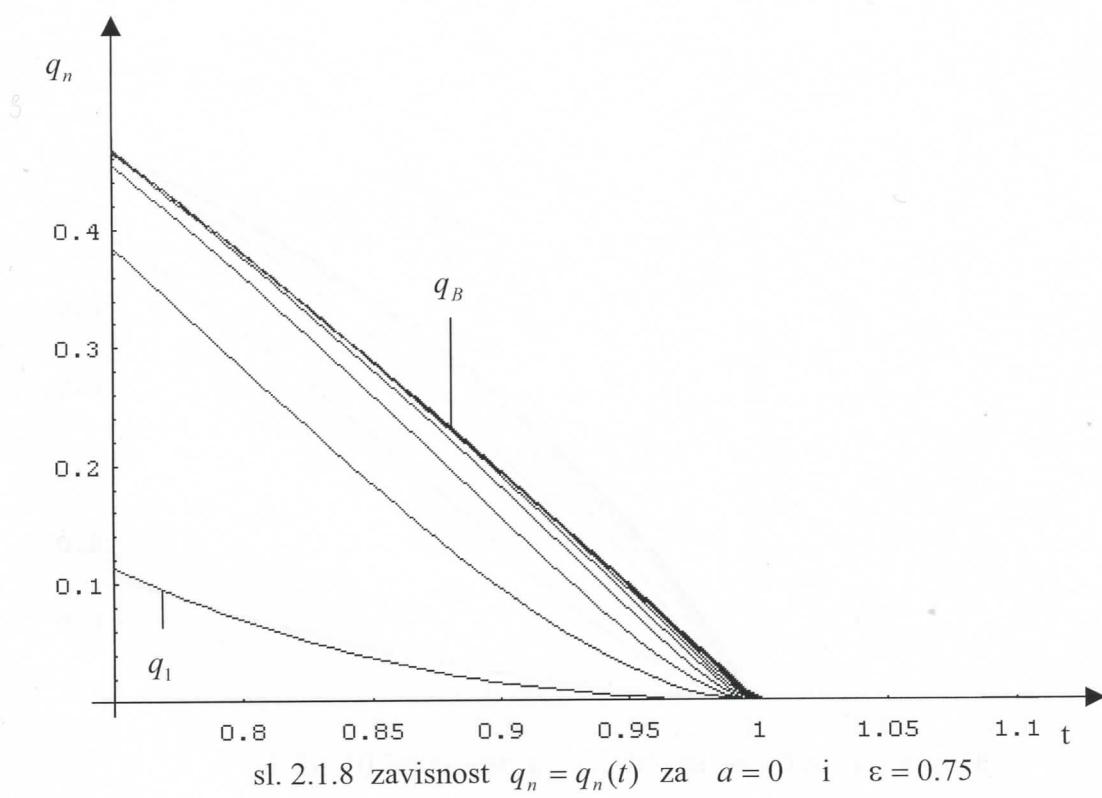
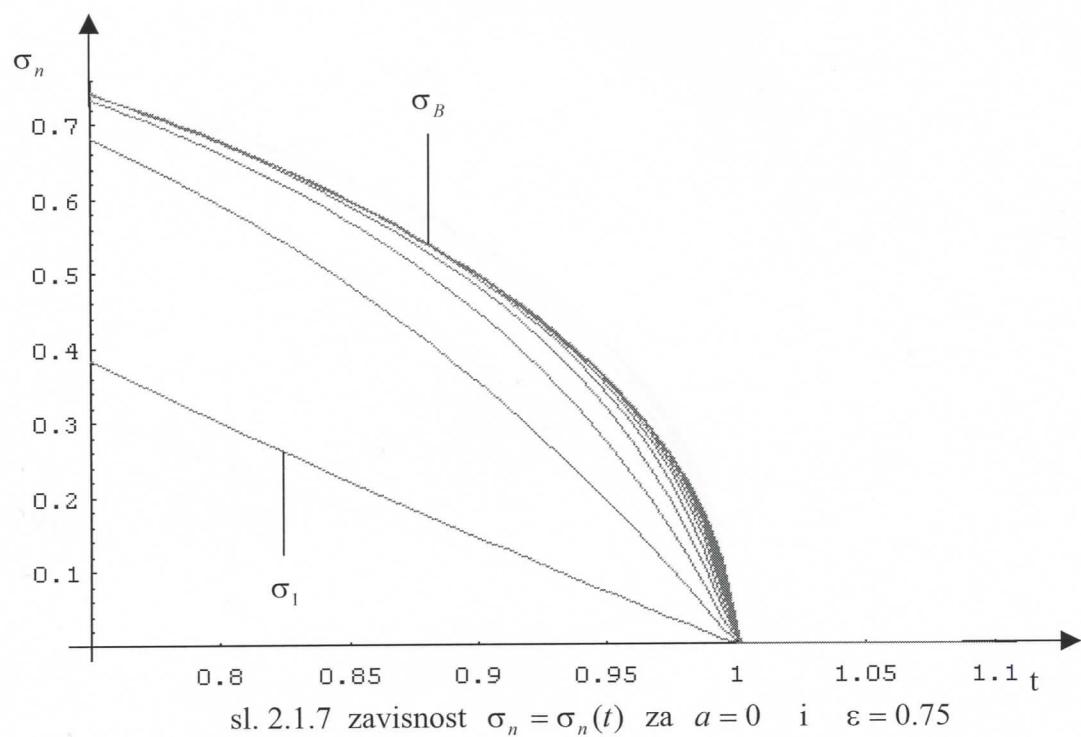
sl. 2.1.1 zavisnost $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0.5$ i $\varepsilon = 1$

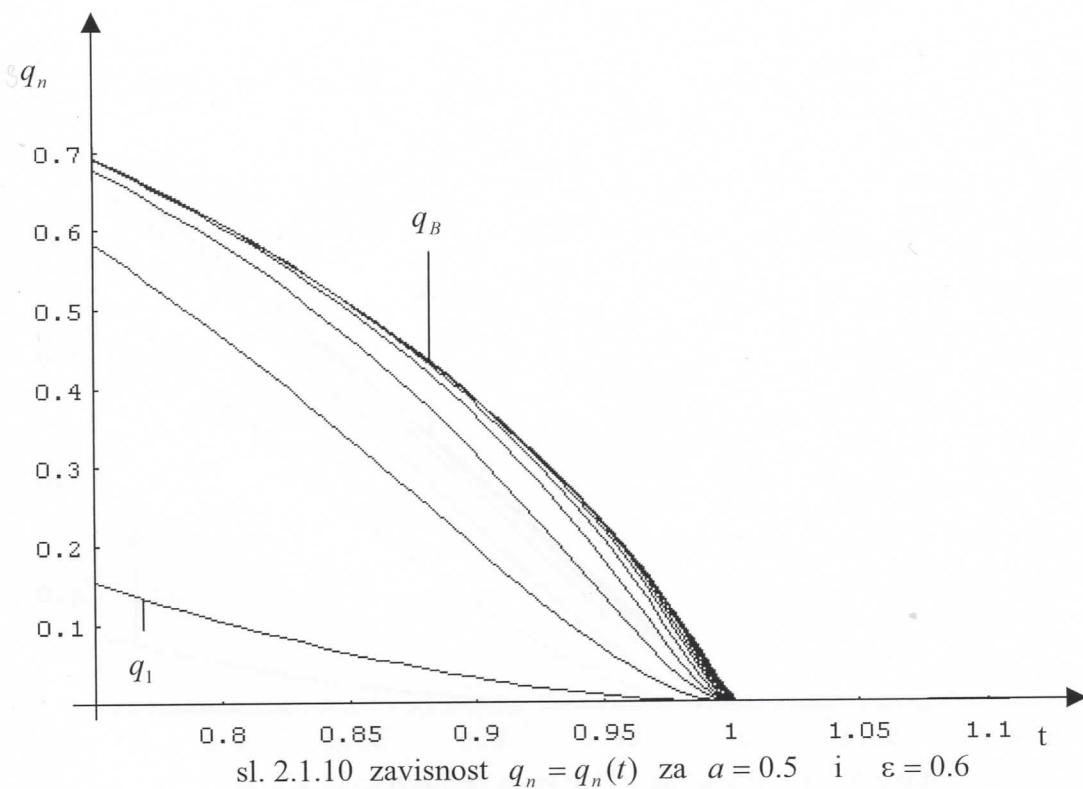
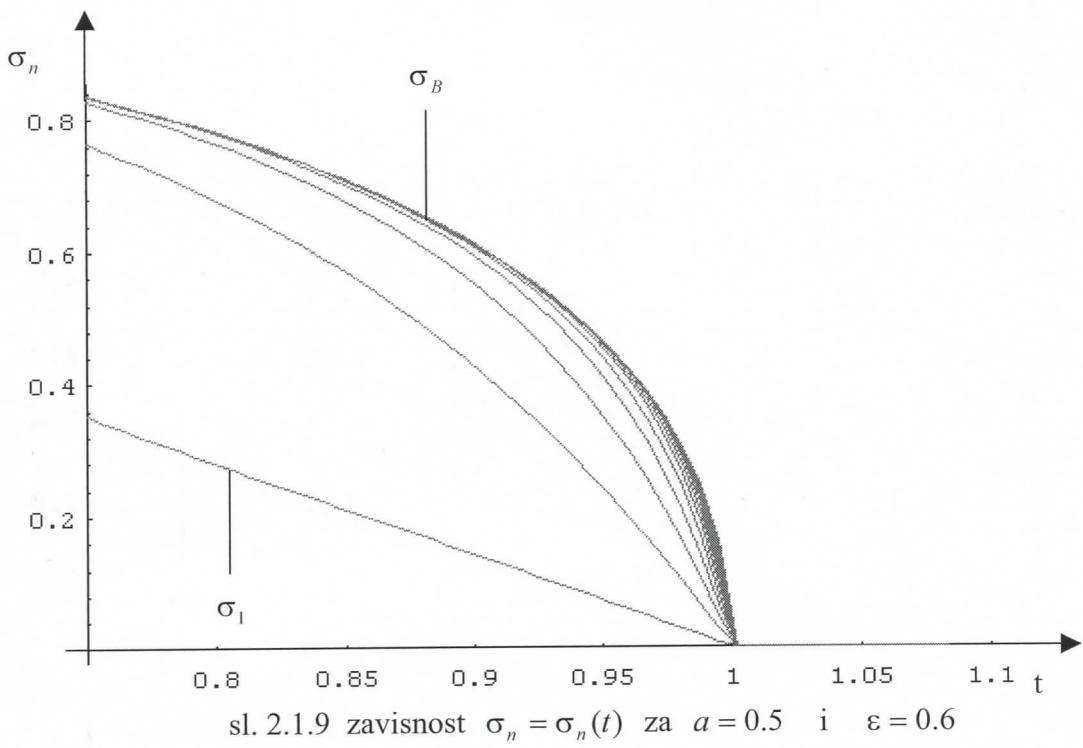


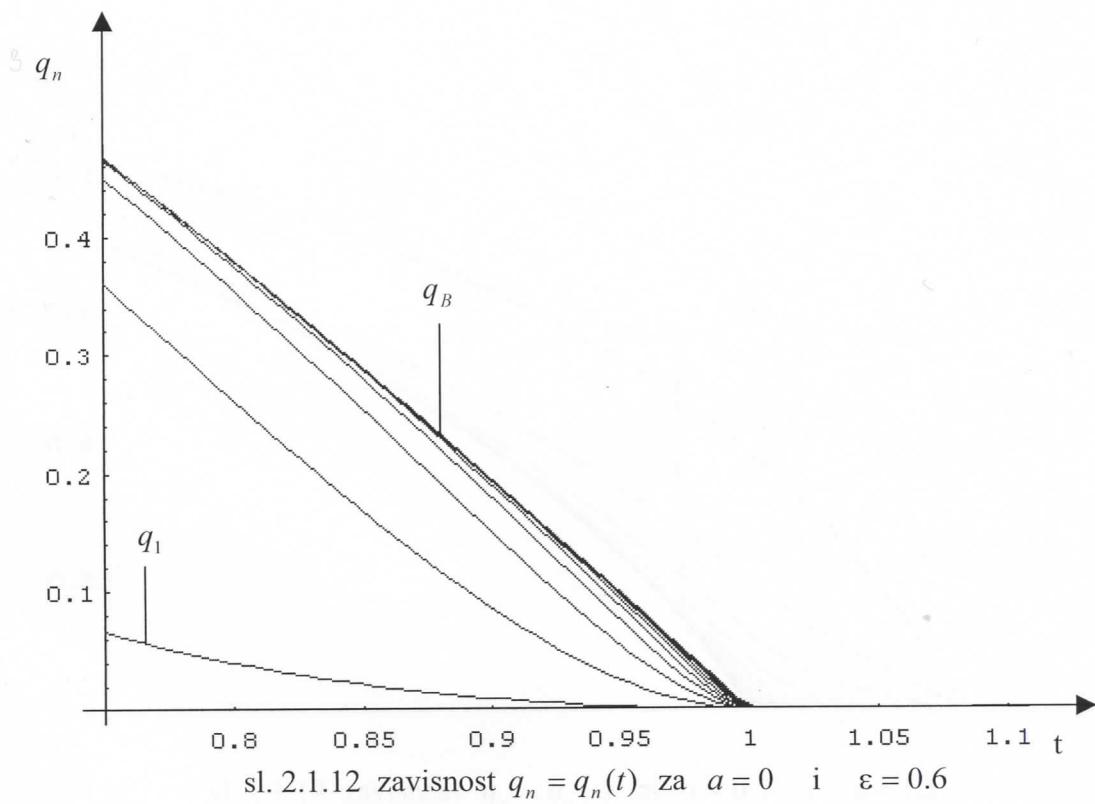
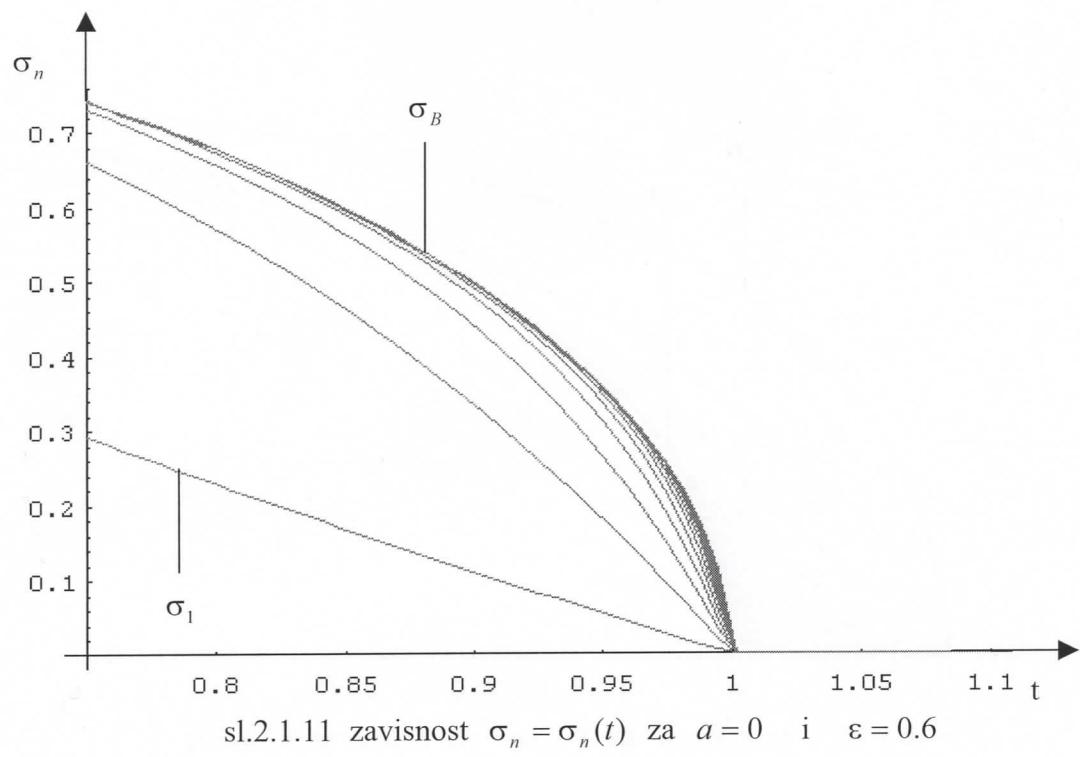
sl.2.1.2 zavisnost $q_n = q_n(t)$ za $a = 0.5$ i $\varepsilon = 1$

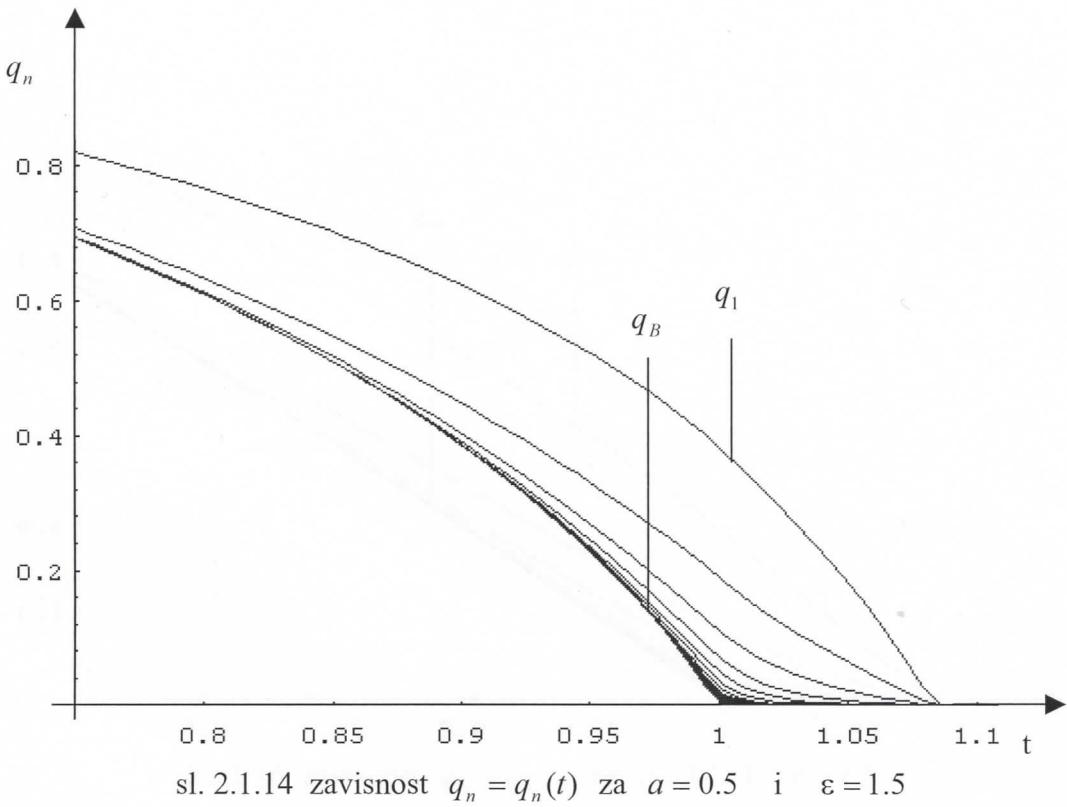
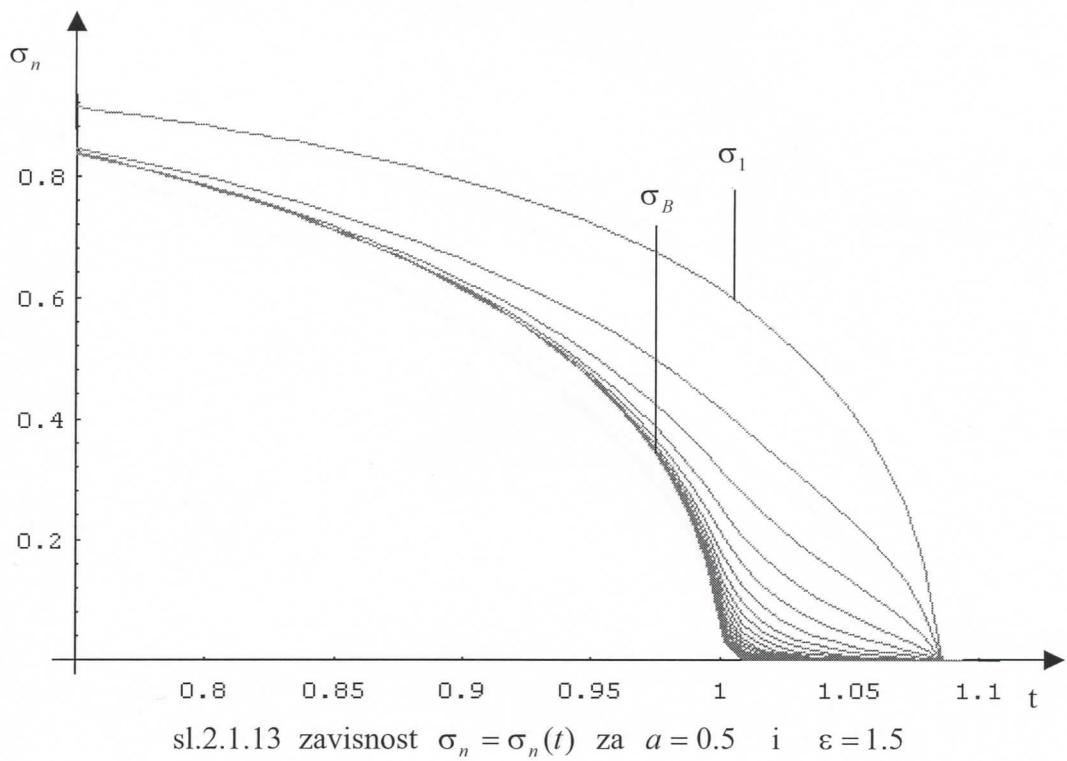


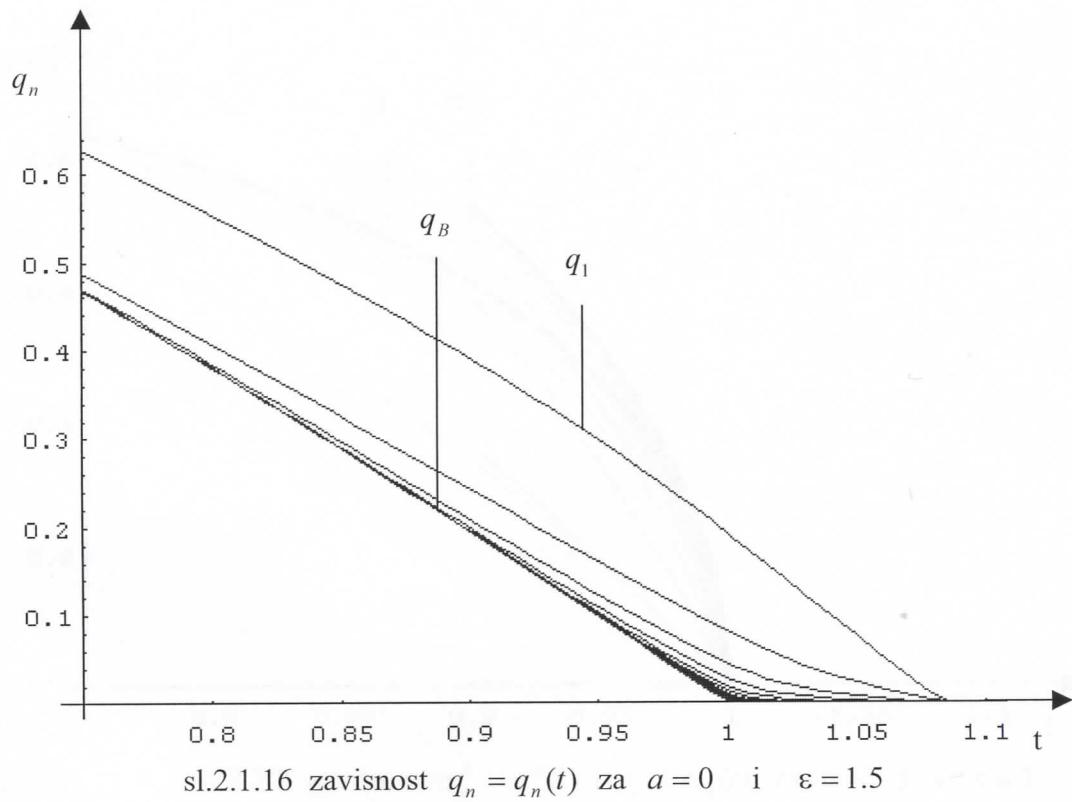
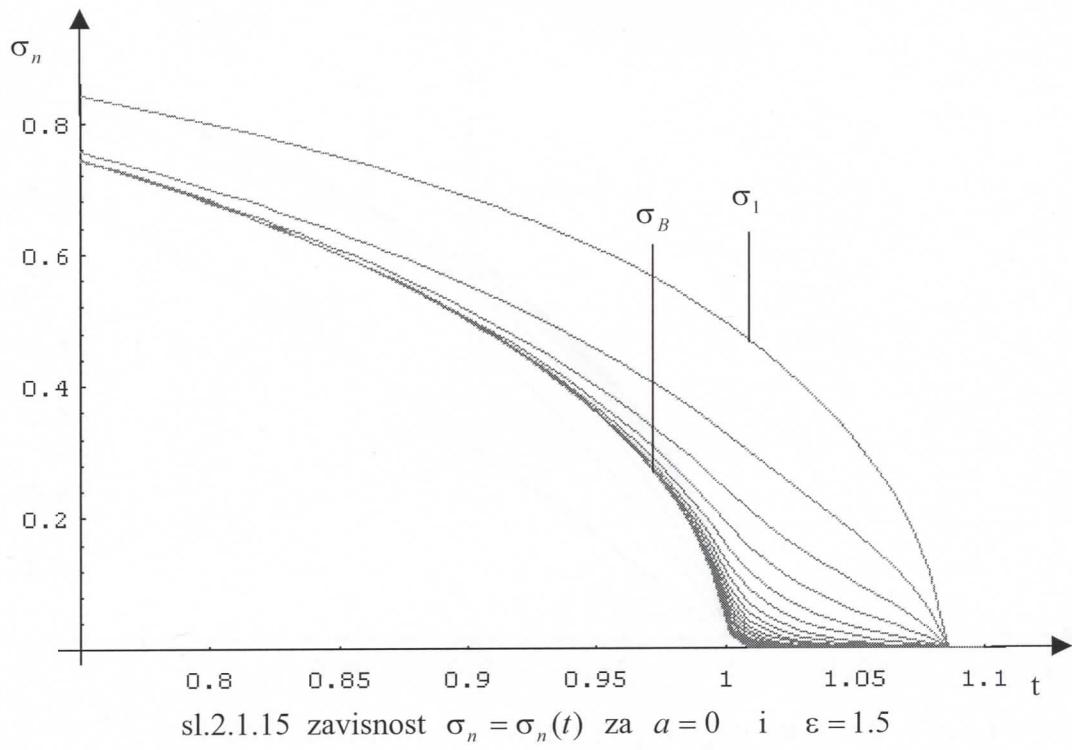


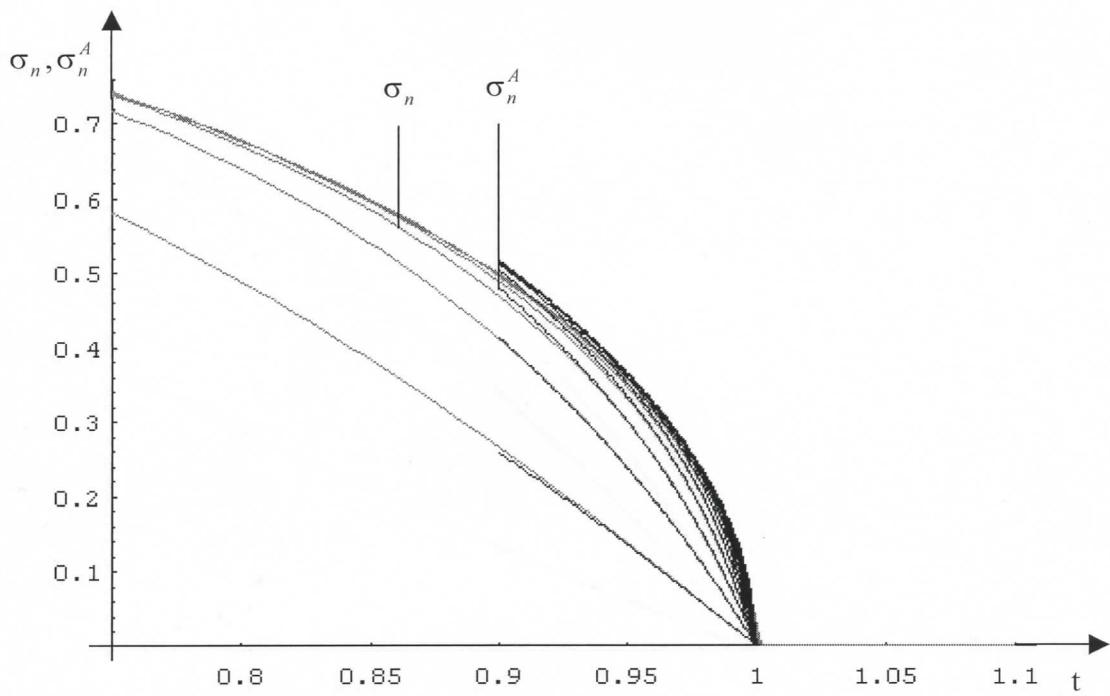




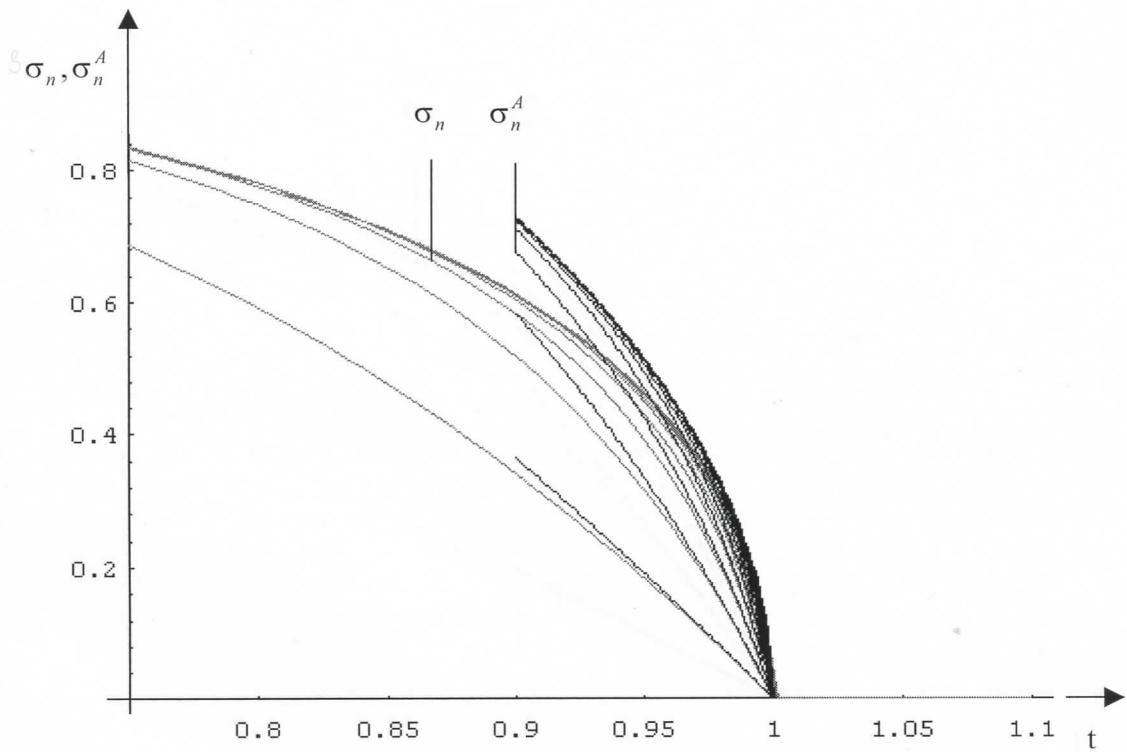




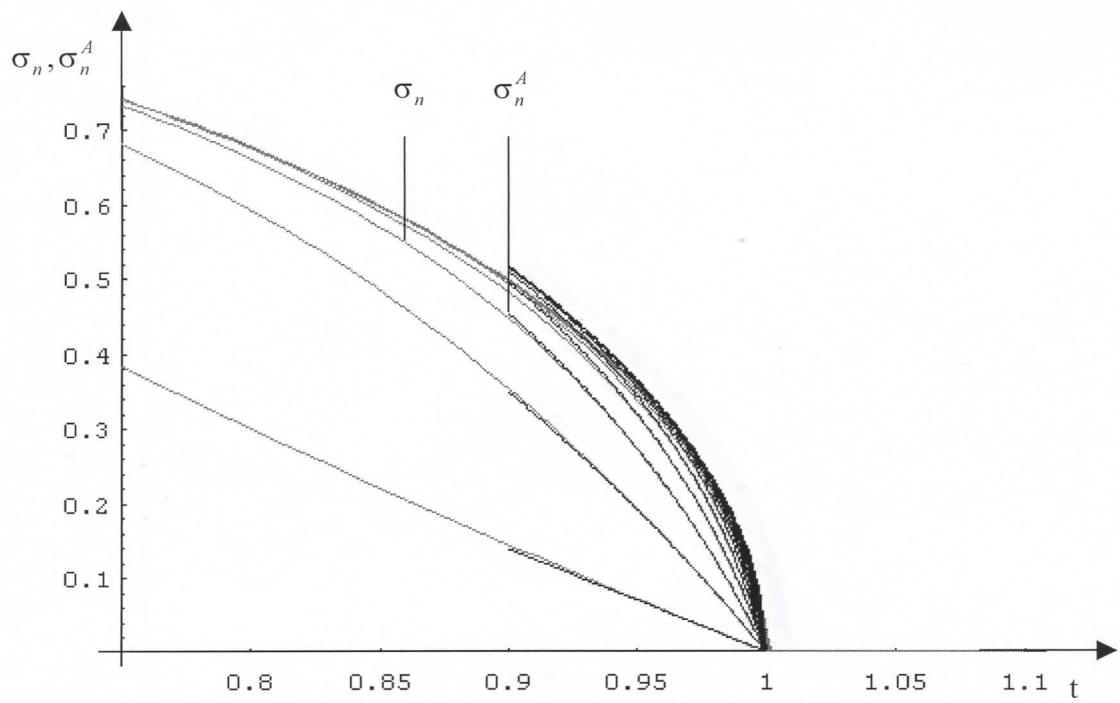




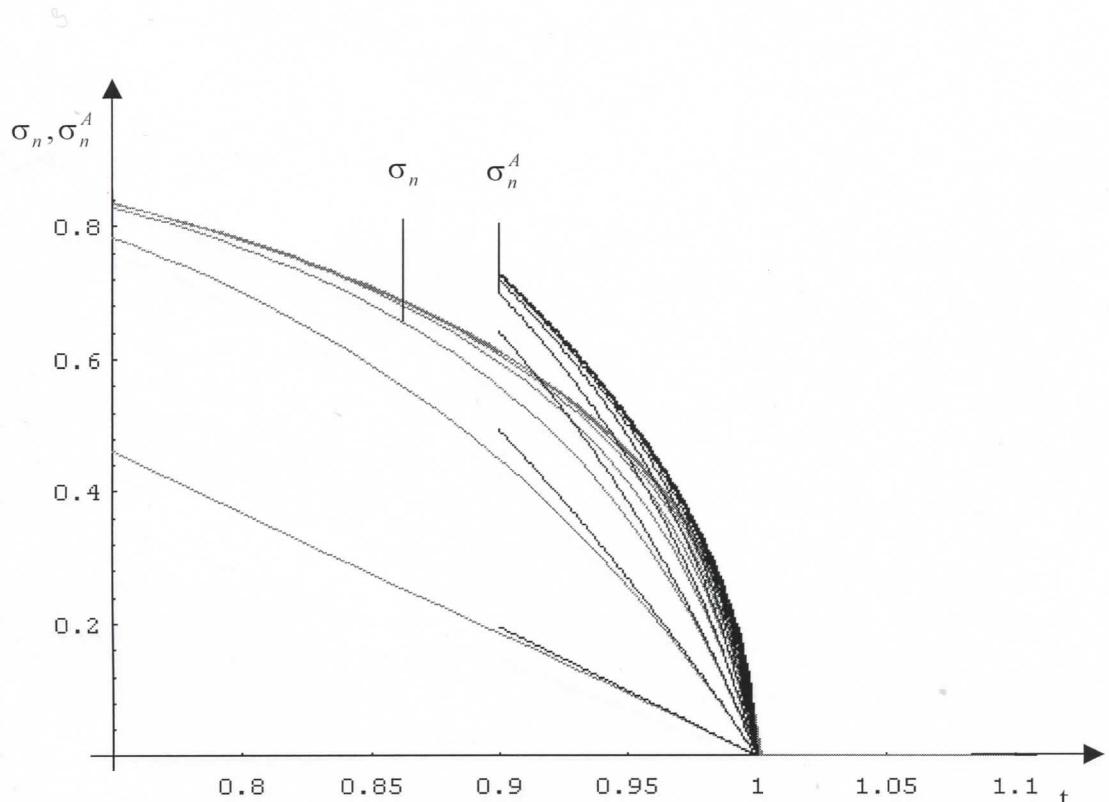
sl. 2.2.1 zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ i $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0$ i $\varepsilon = 1$



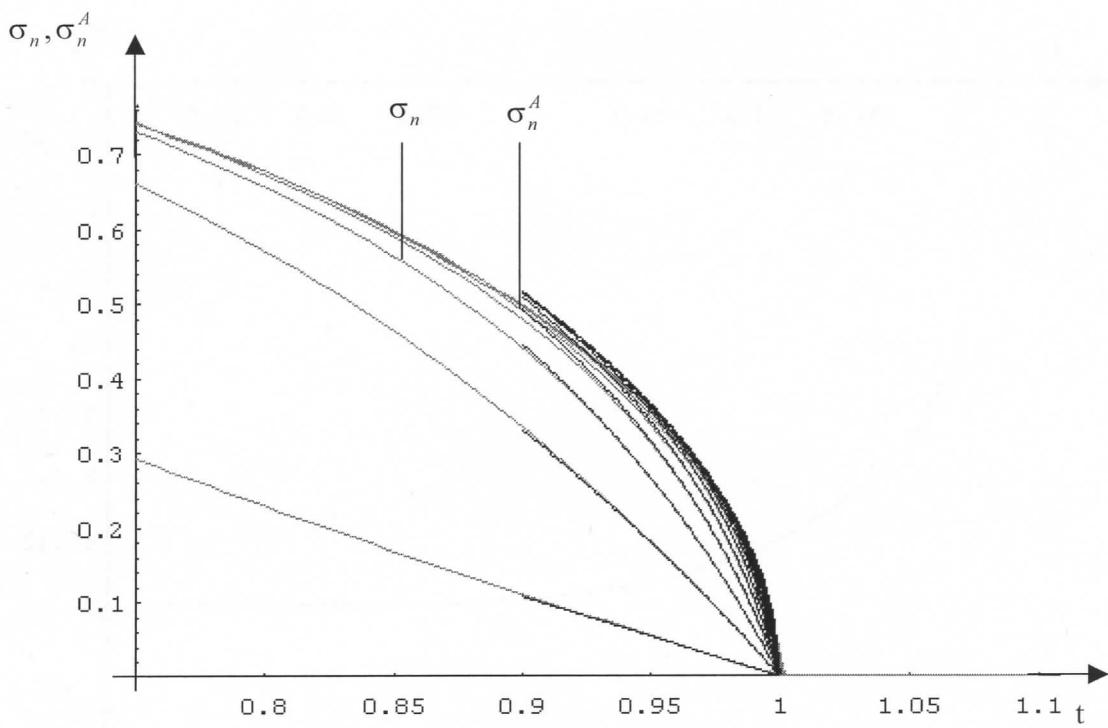
sl. 2.2.2 zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ i $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0.5$ i $\varepsilon = 1$



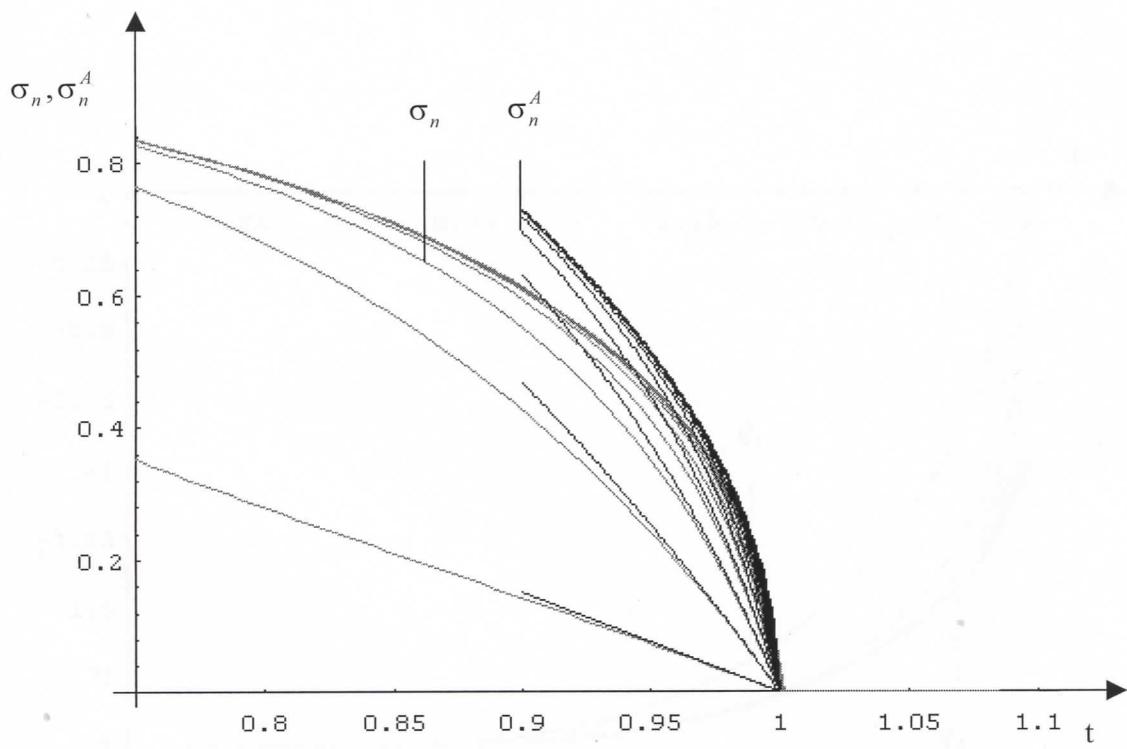
sl. 2.2.3 zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ i $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0$ i $\varepsilon = 0.75$



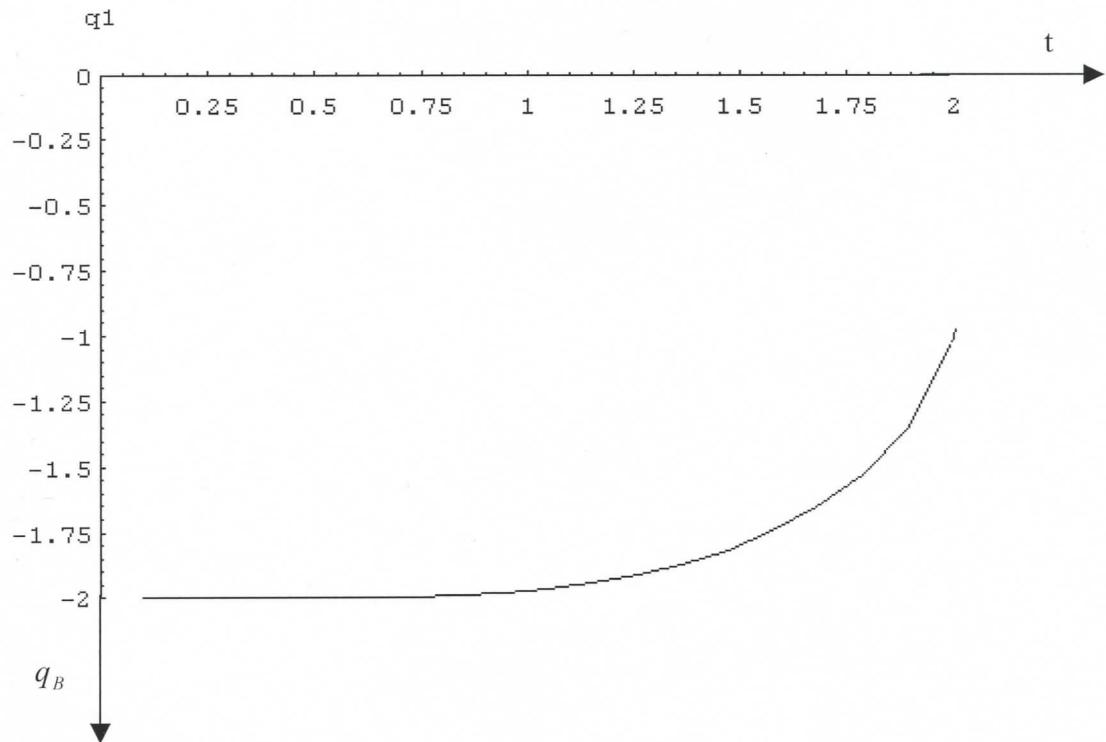
sl. 2.2.4 zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ i $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0.5$ i $\varepsilon = 0.75$



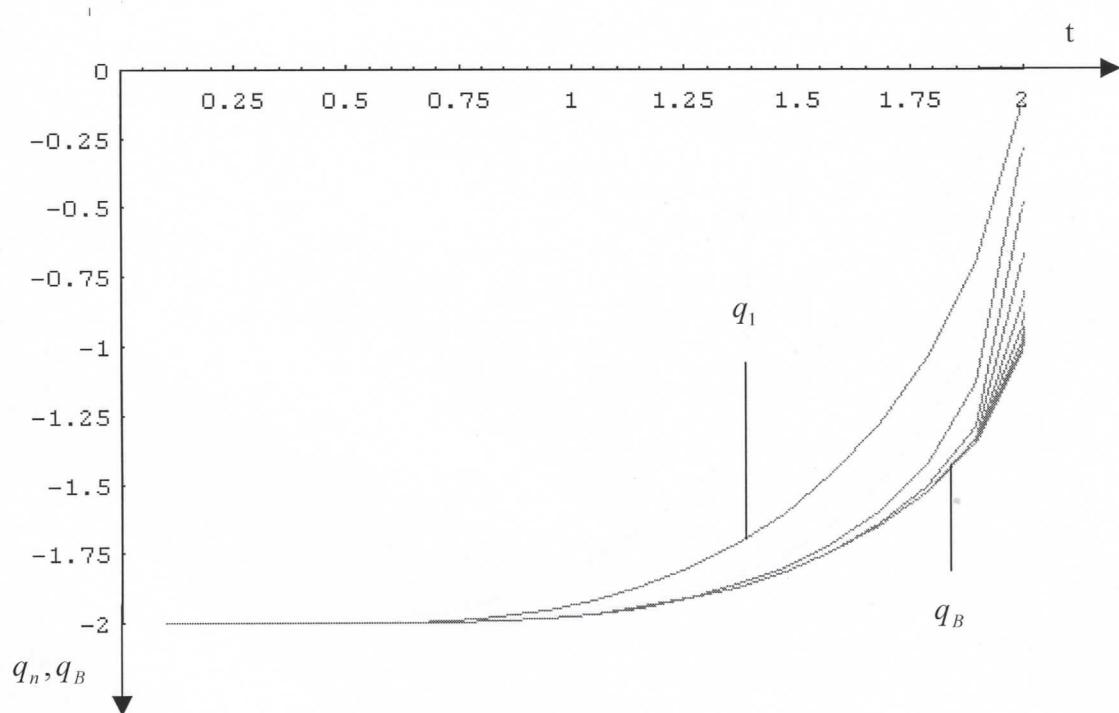
sl. 2.2.5 zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ i $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0$ i $\varepsilon = 0.6$



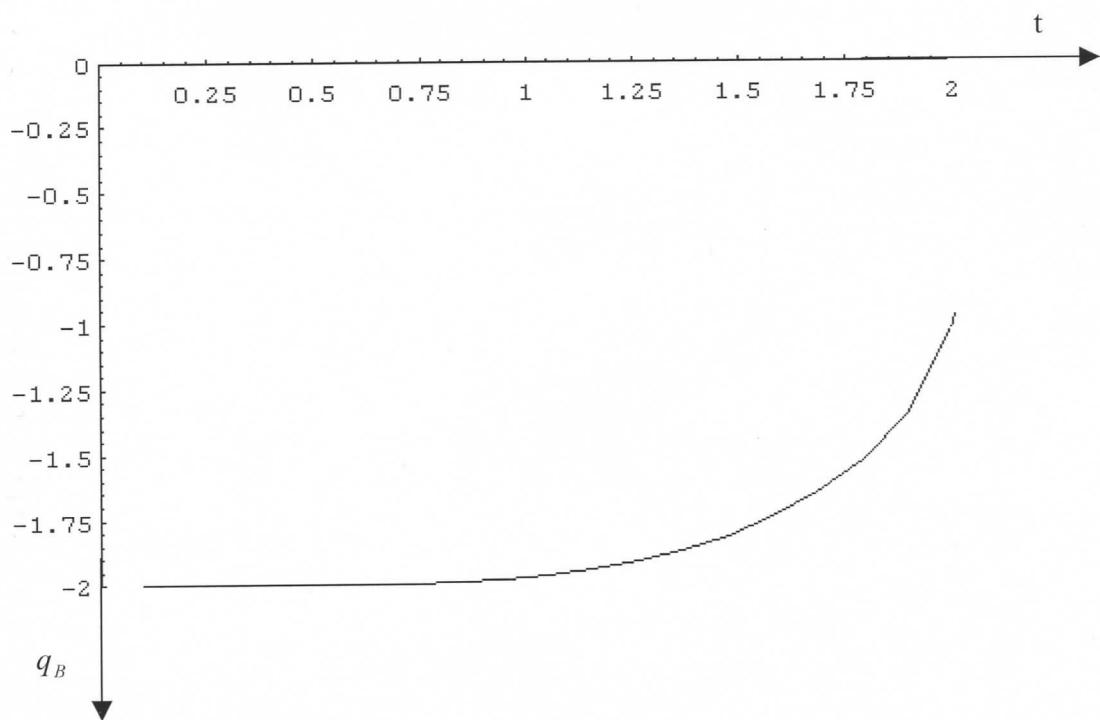
sl. 2.2.6 zavisnost $\sigma_n^A = \sigma_n^A(t)$ i $\sigma_n = \sigma_n(t)$ za $a = 0.5$ i $\varepsilon = 0.6$



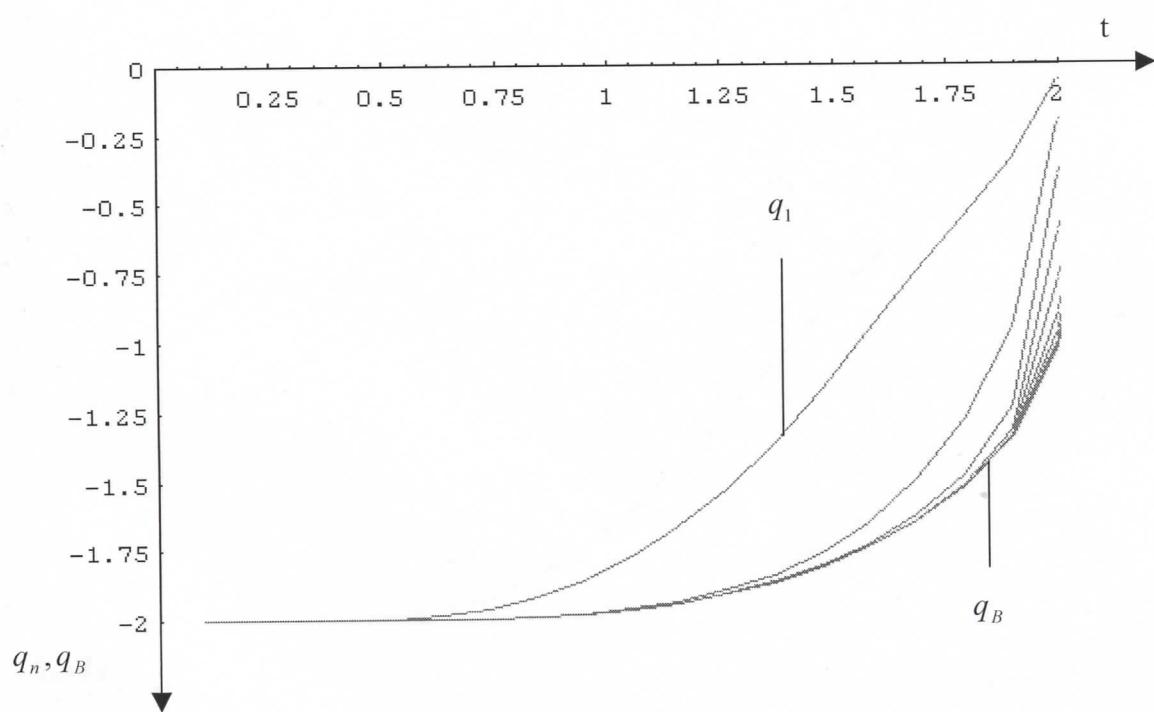
sl. 2.3.1 zavisnost $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 1$



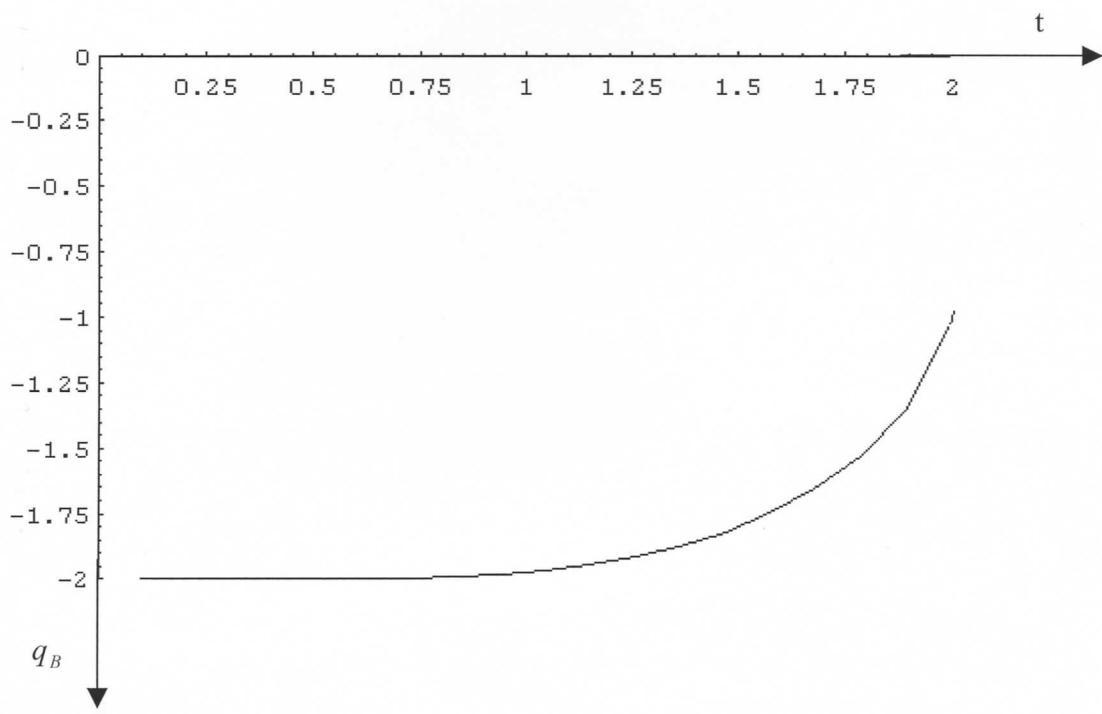
sl. 2.3.2 zavisnost $q_n = q_n(t)$ i $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 1$



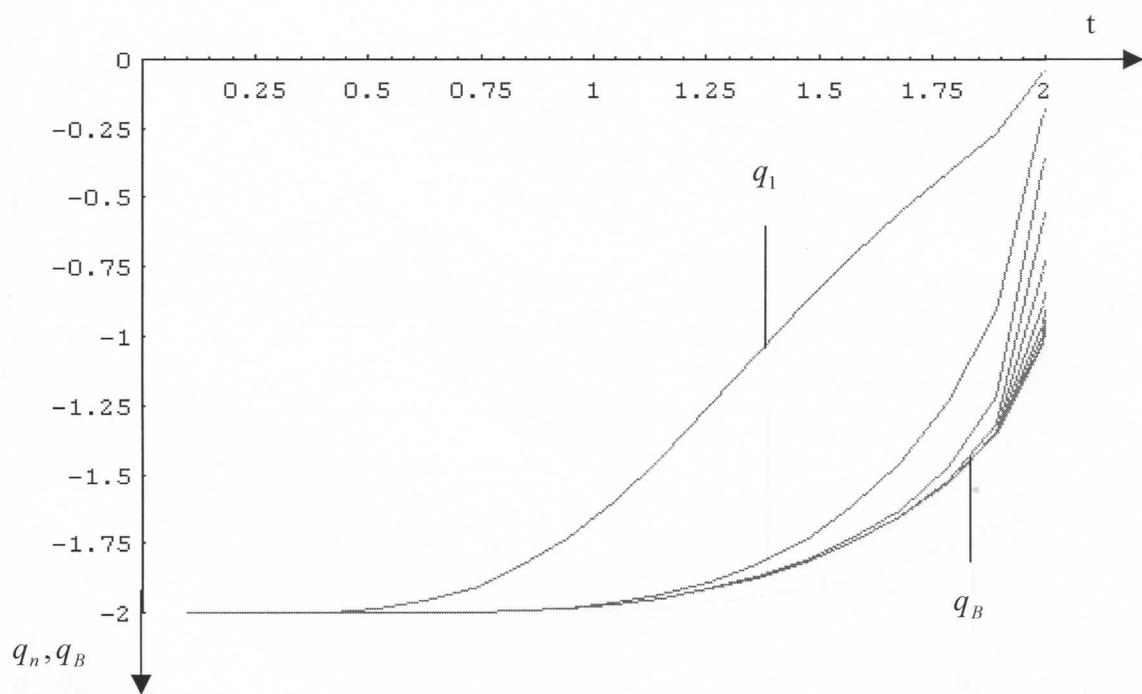
sl. 2.3.3 zavisnost $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 0.75$



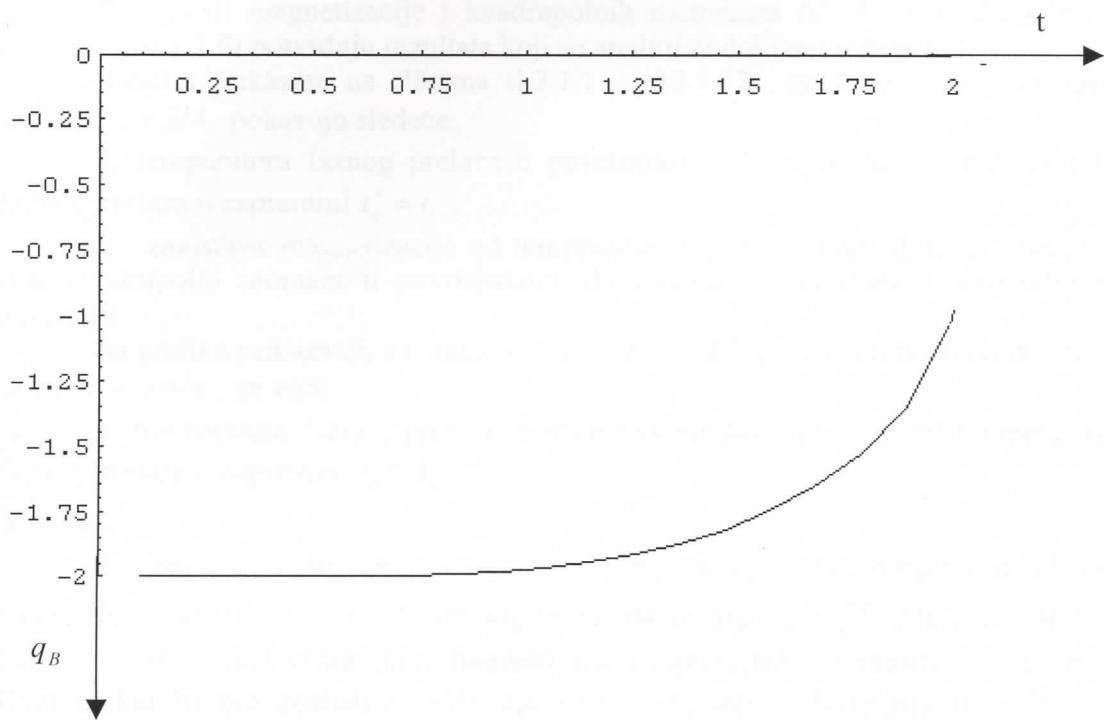
sl. 2.3.4 zavisnost $q_n = q_n(t)$ i $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 0.75$



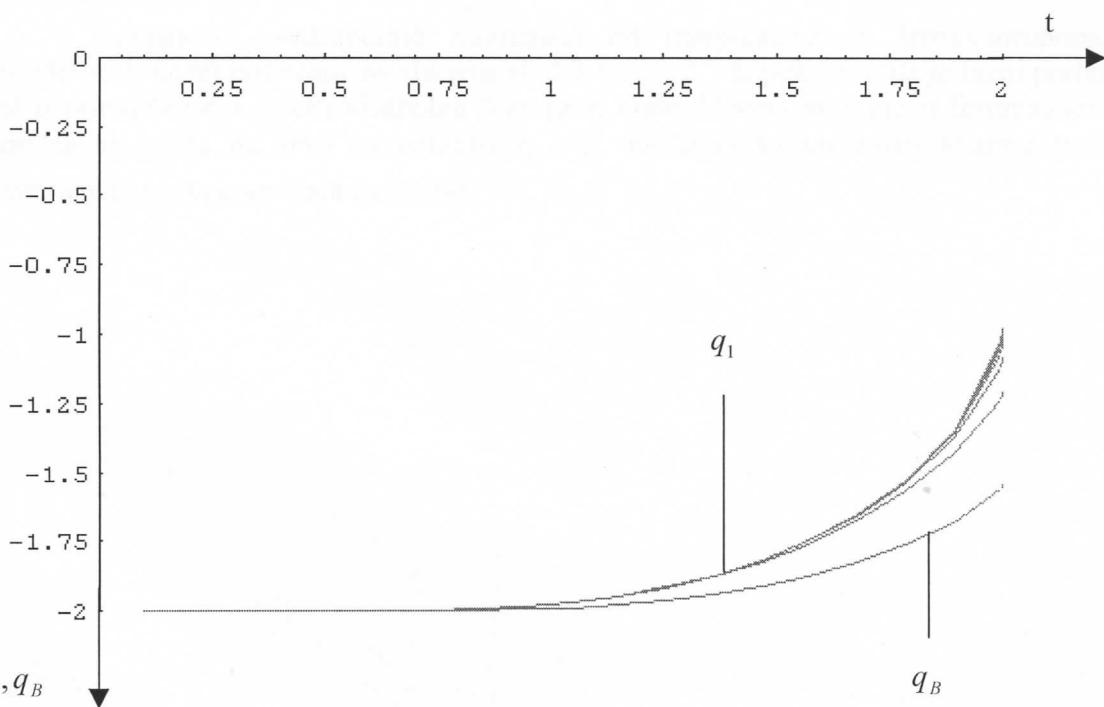
sl. 2.3.5 zavisnost $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 0.6$



sl. 2.3.6 zavisnost $q_n = q_n(t)$ i $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 0.6$



sl. 2.3.7 zavisnost $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 1.5$



sl. 2.3.8 zavisnost $q_n = q_n(t)$ i $q_B = q_B(t)$ za $n = 25$, $a = 1.298$, $\varepsilon = 1.5$

Zavisnosti magnetizacije i kvadrupolnih momenata (sl. 2.1.1 – sl.2.1.16) i (sl.2.2.1 – sl.2.2.6) potvrđuju rezultate koji su analitički dobijeni u delu 1.2 .

Grafici prikazani na slikama sl.2.1.1 – sl.2.1.12 , za vrednosti parametara $a < 1$ i $\epsilon < 5/4$, pokazuju sledeće:

1. temperatuta faznog prelaza u površinskom sloju jednaka je temperaturi faznog prelaza u zapremini $t_c^* = t_c$

2. zavisnost magnetizacije od temperature u površinskom sloju je linearna, dok kvadrupolni moment u površinskom sloju pokazuje kvadratnu temperaturnu zavisnost.

Sa grafika prikazanih na slikama sl.2.1.13 – sl.2.1.16, za vrednosti parametara $a < 1$ i $\epsilon > 5/4$, se vidi:

1. temperatuta faznog prelaza u površinskom sloju je veća od temperaturu faznog prelaza u zapremini $t_c^* > t_c$

$$q_{26} = q_{25}$$

2. zbog uvedene aproksimacije $\sigma_{26} = \sigma_{25}$ i $q_{26} = q_{25}$ izbegava se efekat smanjenja magnetizacije i kvadrupolnog momenta za $n_B < n \leq 25$, gde je n_B sloj u kome magnetizacija i kvadrupolni moment imaju zapreminske vrednosti σ_B i q_B . Ovaj efekat bi bio posledica rešavanja sistema konačnih dimenzija $n = 25$, za vrednosti $\sigma_{26} = q_{26} = 0$. Tada su srednja polja izmene koja deluju na σ_{25} i q_{25} manjeg intenziteta (broj suseda je manji) u odnosu na vrednosti u zapremini, a manjeg intenziteta su i u odnosu na površinski sloj pošto je $\epsilon = 1.5 > 1$. Ovaj uticaj bi se dalje prenosio i na slojeve $n_B < n < 25$.

Grafici prikazani na slikama sl.2.2.1 – sl.2.2.6 pokazuju dobro slaganje približnog analitičkog rešenja za magnetizaciju σ_n^A , sa tačnim rešenjem σ_n , u temperaturnom intervalu $0.9 \leq t \leq t_c = 1$.

Zavisnosti kvadrupolnih momenata od temperature za ferokvadrupolno uređenje, koje su prikazane na slikama sl. 2.3.1 – sl. 2.3.8, pokazuju da je fazni prelaz iz paramagnetne u ferokvadrupolnu fazu prve vrste. U svakom sloju u feromagnetu prelaz se javlja na istoj temperaturi $t_Q = 2$, na kojoj se vrednosti kvadrupolnih momenata u svakom sloju razlikuju.

ZAKLJUČAK

Imajući u vidu postavljeni cilj ovog rada, može se zaključiti da je on u potpunosti ostvaren.

U prvom poglavlju ovog rada analitički su izračunati izrazi za magnetizaciju i kvadrupolni moment beskonačnog i polubeskonačnog Heisenberg – ovog feromagneta sa bikvadratnom interakcijom i spinom $S=1$, u aproksimaciji molekulskog polja. Određen je uticaj bikvadratne interakcije na magnetno uređenje i fazne prelaze. Za polubeskonačan feromagnet nađeno je približno analitičko rešenje sistema jednačina za magnetizaciju i kvadrupolni moment u blizini tačke faznog prelaza u zapremini i nađene su temperature faznih prelaza u površinskom sloju i u zapremini sistema.

U drugom poglavlju izvršena je numerička analiza sistema nelinearnih diferencnih jednačina za magnetizaciju i kvadrupolni moment i magnetizacije u blizini tačke faznog prelaza u zapremini, za slučaj feromagnetskog uređenja kod polubeskonačnog feromagneta. Zavisnost magnetizacije i kvadrupolnog momenta od temperature prikazana je grafički za više vrednosti parametara sistema. Pokazano je, takođe da se približna analitička rešenja u okolini t_c dobro slažu sa numeričkim rezultatima u oblasti temperatura $0.9t_c < t < t_c$. Numerički je rešen i sistem nelinearnih diferencnih jednačina za kvadrupolne momente i kvadrupolni moment u zapremini u slučaju ferokvadrupolnog uređenja. Temperaturne zavisnosti kvadrupolnih momenata u ovom slučaju ukazuju na fazni prelaz prve vrste iz paramagnete u ferokvadrupolu fazi, koji se za svaki sloj javlja na istoj temperaturi na kojoj se vrednosti kvadrupolnih momenata po slojevima razlikuju.

LITERATURA

- [1] M.S.Milošević: Uvod u kvantnu teoriju sistema mnoštva čestica, Institut za fiziku, Beograd, 1968
- [2] H.H.Chen, P.M.Levy, Phys. Rev. B7, 4267, 1973
- [3] Mario J.Škrinjar, Olivera Ciraj, Milica Pavkov i Stanoje Stojanović, SFIN IX (1) 78, (1996)
- [4] Svetislav Lazarev, Mario J.Škrinjar, Darko Kapor and Stanoje Stojanović, Physica A 250 453, (1998)
- [5] Olivera Ciraj: Diplomski rad, Institut za fiziku, Novi Sad, 1995
- [6] P.W.Palmberg, R.E. De Wames and L.A.Vredevoe, Phys. Rev. Lett. 21 682 (1968)
- [7] G.V.Milovanović: Numerička analiza I deo, Naučna knjiga, Beograd, 1988
- [8] D.Herceg, Numeričke i statističke metode u obradi eksperimentalnih podataka, Institut za matematiku, Novi Sad, 1989
- [9] D.Herceg, Z.Stojaković: Numeričke metode linearne algebре, Institut za matematiku Sad, 1988
- [10] N.Krejić, Đ.Herceg: Matematika i *Matematica*, Institut za matematiku, Novi Sad, 1993

PRILOG

```

(*                                         *)
(*                                         *)
(*                                         PROGRAM 1 *)
(*                                         *)
(*                                         rešavanje sistema jednačina ( 2.1) *)
(*                                         *)
(*                                         ulazni podaci *)
(*                                         *)
(*                                         indat - fajl sa vrednostima: a , Is , I , n *)
(*                                         p1 - donja granica temperaturnog intervala *)
(*                                         p2 - gornja granica temperaturnog intervala *)
(*                                         p3 - temperaturni korak *)
(*                                         brt - broj temperaturnih tačaka *)
(*                                         *)
(*                                         *)
Clear[t,tt,ta1,a,aa,a1,a2,a3,a4,a41,b1,b2,b3,b4,
cac,ca1,ca2,ca3,cak,can,r,rez,11,12,lg1,lg2,g1,g2,p1,p2,p3,brt]
aa=ReadList["indat"];
a=aa[[1]];
a1:=a[[1]]
a2:=a[[2]]
a3:=a[[3]]
a4:=a[[4]]
a41=a4/2;
p1=;
p2=;
p3=;
`brt=;
b1[k_,i_]:= (*
(*          b1[n,t] - jednačine za σn *)
(*
If[k==1,(2*Sinh[(2-a1)*(4*a2*x[1]+a3*x[2])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]/
(Exp[-a1*(4*a2*y[1]+a3*y[2])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))]+2*Cosh[(2-a1)*
(4*a2*x[1]+a3*x[2])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))])-x[1]==0,
If[k==a41,(2*Sinh[(2-a1)*(4*a3*x[a41]+a3*x[a41-1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]/(Exp[-a1*(4*a3*y[a41]+a3*y[a41-1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]+2*Cosh[
(2-a1)*(4*a3*x[a41]+a3*x[a41-1])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))]-x[a41]==0,
(2*Sinh[(2-a1)*(4*a3*x[k]+a3*x[k-1]+a3*x[k+1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]/(Exp[-a1*(4*a3*y[k]+a3*y[k-1]+a3*y[k+1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]+2*Cosh[(2-a1)*(4*a3*x[k]+a3*x[k-1]+a3*x[k+1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]-x[k]==0])
b2[k_,i_]:= (*
(*          b2[n,t] - jednačine za qn *)
(*
If[k==1,(6*Cosh[(2-a1)*(4*a2*x[1]+a3*x[2])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]/
(Exp[-a1*(4*a2*y[1]+a3*y[2])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))]+2*Cosh[(2-a1)*
(4*a2*x[1]+a3*x[2])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))])-2-y[1]==0,
If[k==a41,(6*Cosh[(2-a1)*(4*a3*x[a41]+a3*x[a41-1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]/(Exp[-a1*(4*a3*y[a41]+a3*y[a41-1])/
(2*(2*(2-a1)*a3*i))]+2*Cosh[

```

```

(2-a1)*(4*a3*x[a41]+a3*x[a41-1])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))]-2-y[a41]==0,
(6*Cosh[(2-a1)*(4*a3*x[k]+a3*x[k-1]+a3*x[k+1])/(
2*(2*(2-a1)*a3*i))])/
(Exp[-a1*(4*a3*y[k]+a3*y[k-1]+a3*y[k+1])/(2*(2*(2-a1)*a3*i))]+
2*Cosh[(2-a1)*(4*a3*x[k]+a3*x[k-1]+a3*x[k+1])/(
2*(2*(2-a1)*a3*i))])-2-y[k]==0]]
b3[i_]:=Table[b1[k,i],{k,1,a41}]
b4[i_]:=Table[b2[k,i],{k,1,a41}]
cac[i_]:=Union[b3[i],b4[i]]
ca1[i_]:=Table[{x[k],1},{k,1,a41}]
ca2[i_]:=Table[{y[k],1},{k,1,a41}]
ca3[i_]:=Union[ca1[i],ca2[i]]
cak[i_]:=Prepend[ca3[i],cac[i]]
c[k_]:=cak[i][[k]];
can=cak[i][[1]];
r[i_]={};
Do[r[i]=FindRoot[can,c[2],c[3],c[4],c[5],c[6],c[7],c[8],c[9],c[10],
c[11],c[12],c[13],c[14],c[15],c[16],c[17],c[18],c[19],c[20],c[21],
c[22],c[23],c[24],c[25],c[26],c[27],c[28],c[29],c[30],c[31],c[32],
c[33],c[34],c[35],c[36],c[37],c[38],c[39],c[40],c[41],c[42],c[43],
c[44],c[45],c[46],c[47],c[48],c[49],c[50],c[51]],{i,p1,p2,p3}];
rez:=Table[r[i],{i,p1,p2,p3}]
t=Table[i,{i,p1,p2,p3}];
tt[i_]:=t[[i]];
l1[i_]:=x[i]/.rez
l2[i_]:=y[i]/.rez
g1[i_,k_]:=l1[k][[i]]
g2[i_,k_]:=l2[k][[i]]
ta1[k_]:=Table[{tt[i],g1[i,k]},{i,brt}]
Do[ta1[i]>>>outdat1,{i,1,a41}]
(* *)
(*      outdat1 - fajl sa vrednostima magnetizacije u temperaturnim tačkama *)
(* *)
ta2[k_]:=Table[{tt[i],g1[i,k]},{i,brt}]
Do[ta2[i]>>>outdat2,{i,1,a41}]
(* *)
(*      outdat2 - fajl sa vrednostima kvadrupolnog momenta u temperaturnim tačkama *)
(* *)
gr1[i_]:=ListPlot[ta1[i],AxesLabel->{"t","gn",
},AxesOrigin->{p1,0},PlotStyle->{RGBColor[1,0,0]},
PlotJoined->True]
(* *)
(*      gr1[n] - grafici zavisnosti magnetizacije od temperature *)
(* *)
gr2[i_]:=ListPlot[ta2[i],AxesLabel->{"t","qn",
},AxesOrigin->{p1,0},PlotStyle->{RGBColor[0,0,1]},
PlotJoined->True]
(* *)
(*      gr2[n] - grafici zavisnosti kvadrupolnog momenta od temperature *)
(* *)
Show[gr1[1],gr1[2],gr1[3],gr1[4],gr1[5],gr1[6],gr1[7],gr1[8],
gr1[9],gr1[10],gr1[11],gr1[12],gr1[13],gr1[14],gr1[15],gr1[16],
gr1[17],gr1[18],gr1[19],gr1[20],gr1[21],gr1[22],gr1[23],gr1[24],
gr1[25]]
Show[gr2[1],gr2[2],gr2[3],gr2[4],gr2[5],gr2[6],gr2[7],gr2[8],
gr2[9],gr2[10],gr2[11],gr2[12],gr2[13],gr2[14],gr2[15],gr2[16],
gr2[17],gr2[18],gr2[19],gr2[20],gr2[21],gr2[22],gr2[23],gr2[24],
gr2[25]]

```

```

(*                                         *)
(*                                         *)
(*                                         PROGRAM 2 *)
(*                                         *)
(*                                         rešavanje sistema jednačina ( 2.2) *)
(*                                         *)
(*                                         ulazni podaci *)
(*                                         *)
(*                                         indat – fajl sa vrednostima: a , Is , I , n *)
(*                                         p1 – donja granica temperaturnog intervala *)
(*                                         p2 – gornja granica temperaturnog intervala *)
(*                                         p3 – temperaturni korak *)
(*                                         p4 – donja granica temperaturnog intervala kod programa1 *)
(*                                         *)
Clear[t,t1,t2,a,aa,a1,a2,a3,a4,a41,p11,p22,x,l1,l2,l3,l4,dim,dim1,
gr1,gr2,p1,p2,p3,p4]
aa=ReadList["indat"];
a=aa[[1]];
a1:=a[[1]];
a2:=a[[2]];
a3:=a[[3]];
a4:=a[[4]];
a41=a4/2;
p1=;
p2=;
p3=;
p4=;
t=ReadList["outdat1"];
(*   outdat1 - fajl sa vrednostima magnetizacije u tačkama temperature iz programa1      *)
(*   koristi se zbog zajedničkog prikazivanja rešenja programa1 i programa2      *)
t1[i_]:=t[[i]];
t2[i_]:=ListPlot[t1[i],AxesLabel->{"t","σn"
(*           t2[n] - grafici zavisnosti σn od temperature      *)
},AxesOrigin->{p4,0},PlotStyle->{RGBColor[1,0,0]},PlotJoined->True];
gr1[1_]:=Show[t2[1],t2[2],t2[3],t2[4],t2[5],t2[6],t2[7],t2[8],
t2[9],t2[10],t2[11],t2[12],t2[13],t2[14],t2[15],t2[16],
t2[17],t2[18],t2[19],t2[20],t2[21],t2[22],t2[23],t2[24],
t2[25]];
p11=Sqrt[3.];
p22=2*Sqrt[(2*(2-2*a1))/(3*(2-3*a1))];
x[i_,j_]:=p22*Sqrt[1-i]*Tanh[p11*Sqrt[1-i]*(j-(4*(1-a2/a3))/(
1+4*(1-a2/a3)))];
(*           x[t,n] - σna      *)
l=Table[x[i,j],{j,1,a41},{i,p1,p2,p3}];
l1[i_]:=l[[i]];
l2=Table[i,{i,p1,p2,p3}];
dim=Dimensions[l2];
dim1=dim[[1]];
l3[k_]:=Table[{l2[[i]],l1[k][[i]]},{i,1,dim1}]
l4[i_]:=ListPlot[l3[i],AxesLabel->{"t","σna"
(*           l4[n] - grafici zavisnosti σna od temperature      *)
},AxesOrigin->{p1,0},PlotStyle->{RGBColor[0,0,0]},PlotJoined->True];
gr2[1_]:=Show[l4[1],l4[2],l4[3],l4[4],l4[5],l4[6],l4[7],l4[8],
l4[9],l4[10],l4[11],l4[12],l4[13],l4[14],l4[15],l4[16],
l4[17],l4[18],l4[19],l4[20],l4[21],l4[22],l4[23],l4[24],
l4[25]];
Show[gr1[1],gr2[1]]
(*

```

```

(*                                         *)  

(*                                         *)  

(*                                         *)  

(*                                         – rešavanje sistema jednačina (2.3) *)  

(*                                         – rešavanje jednačine (2.4) *)  

(*                                         *)  

(*                                         ulazni podaci *)  

(*                                         *)  

(*                                         indat – fajl sa vrednostima: a , Is , I , n *)  

(*                                         p1 = 1 *)  

(*                                         p2 – broj temperaturnih tačaka *)  

(*                                         p3 – donja granica temperaturnog intervala *)  

(*                                         p4 – gornja granica temperaturnog intervala *)  

(*                                         p5 – temperaturni korak *)  

(*                                         *)  

(*                                         rešavanje sistema jednačina (2.3) *)  

(*                                         *)  

Timing[  

Clear[aa,a,a1,a2,a3,a4,a41];  

Clear[qq1,qq2,qq3,qq4,qq5,qq6,qq,qqq,q1];  

Clear[r,rr,rez1,rrez];  

Clear[p,p1,p2,p3,p4,p5];  

Clear[b1,b2,t,tt];  

Clear[bb1,bb2,bb3,bb4,b1b2];  

Clear[gr,ggr];  

Clear[m1,m2,l1,l11,l22,d,dd];  

Clear[j,dm,dmm,lst1];  

aa=ReadList["indat"];  

a=aa[[1]];  

a1:=N[8/(3/Log[4.]+4),6];  

a2:=a[[2]];  

a3:=a[[3]];  

a4:=a[[4]];  

a41=a4/2;  

p1=1;  

p2=;  

p3=;  

p4=;  

p5=N[2./(p2-1)];  

tt=Chop[N[Table[t,{t,p3,p4,p5}],6]];  

(*                                         qq1[n,t] – sistem koji se rešava *)  

(*                                         *)  

qq1[k_,t_]:=(*  

  If[k==1,  

   -2+6/(Exp[-(a1*(4*a2*q[1]+a3*q[2]))/(4*(2-a1)*a3*t)]+2)-q[1]==0,  

   If[k==a41,  

    -2+6/(Exp[-(a1*(a3*q[a41-1]+5*a3*q[a41]))/(4*(2-a1)*a3*t)]+2)-q[a41]==0,  

    -2+6/(Exp[-(a1*(a3*q[k-1]+4*a3*q[k]+a3*q[k+1]))/(4*(2-a1)*a3*t)]+2)  

    -q[k]==0]];  

qq2[t_]:=Table[qq1[k,t],{k,1,a41}];  

Do[  

 t=tt[[j]];  

 lst1=Chop[N[Table[i,{i,-2.,0.,0.1}],6]];  

 dm=Dimensions[lst1];  

 dmm=dm[[1]];  

 bb3[j]=Catch[Do[  

 z[i_]:=lst1[[l[i]]];  

 qq3=Table[{q[k],z[k]},{k,1,a41}];  

 qq4[t_]:=Prepend[qq3,qq2[t]];

```

```

qq5[k_]:=qq4[t][[k]];
qq6=qq4[t][[1]];
r[j_]:=FindRoot[qq6,
qq5[2],qq5[3],qq5[4],qq5[5],qq5[6],qq5[7],
qq5[8],qq5[9],qq5[10],qq5[11],qq5[12],qq5[13],
qq5[14],qq5[15],qq5[16],qq5[17],qq5[18],qq5[19],
qq5[20],qq5[21],qq5[22],qq5[23],qq5[24],qq5[25],qq5[26]];
p[j_]:=Check[r[j],failr[j]];
If[p[j]==r[j],Throw[r[j]]];
,{1[1],1,dmm},{1[2],1,dmm},{1[3],1,dmm},{1[4],1,dmm},{1[5],1,dmm}
,{1[6],1,dmm},{1[7],1,dmm},{1[8],1,dmm},{1[9],1,dmm},{1[10],1,dmm}
,{1[11],1,dmm},{1[12],1,dmm},{1[13],1,dmm},{1[14],1,dmm}
,{1[15],1,dmm},{1[16],1,dmm},{1[17],1,dmm},{1[18],1,dmm}
,{1[19],1,dmm},{1[20],1,dmm},{1[21],1,dmm},{1[22],1,dmm}
,{1[23],1,dmm},{1[24],1,dmm},{1[25],1,dmm}]];
,{j,p1,p2}];
rez=Table[bb3[j],{j,p1,p2}];
qq[i_]:=q[i]/.rez;
qqq[i_]:=Table[{tt[[j]],qq[i][[j]]},{j,p1,p2}];
gr[i_]:=ListPlot[qqq[i],AxesLabel->{"t","qn"
},PlotStyle->{RGBColor[1,0,0]},PlotJoined->True,
PlotRange->{{0,2},{0,-2}}];
(*
(*
rešavanje jednačine (2.4)
*)
*)

m1=-2.;
m2=-1.;

Do[rr[i_]:=FindRoot[6/(Exp[-(3*a1*q1)/(2*(2-a1)*i)]+2)-2-q1==0,
{q1,{m1,m2}}],
{i,p3,p4,p5}];

rrez:=Table[rr[i],{i,p3,p4,p5}];

l1=q1/.rrez;
l11[i_]:=l1[[i]];
d=Dimensions[tt];
dd=d[[1]];

l22=Table[{tt[[i]],l11[i]},{i,1,dd}];

ggr=ListPlot[l22,AxesLabel->{"t","qb"
},PlotStyle->{RGBColor[0,0,0]},PlotJoined->True,
PlotRange->{{0,2},{0,-2}}];
Show[ggr,gr[1],gr[2],gr[3],gr[4],gr[5],gr[6],
gr[7],gr[8],gr[9],gr[10],gr[11],gr[12],gr[13],
gr[14],gr[15],gr[16],gr[17],gr[18],gr[19],gr[20],
gr[21],gr[22],gr[23],gr[24],gr[25],
PlotRange->{{0,2},{0,-2}},AxesLabel->{"t","qn,qb"}];
Chop[rez]]

```