



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI
FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



Ispitivanje uticaja frustracije i ciklične interakcije na Hajzenbergov antiferomagnet tipa La_2CuO_4 u okviru samousaglašene teorije spinskih talasa

– master rad –

Mentor: Doc. Milica Rutonjski

Kandidat: Maja Berović

Novi Sad, 2014

„People like you and I, though mortal of course like everyone else, do not grow old no matter how long we live. What I mean is that we never cease to stand like curious children before the great mystery into which we were born.“

– Albert Ajnštajn u pismu posvećenom Oto Juliusbergu

Kolegama sa godine

Sofki, Moky, Straletu, Arpiju, Vlakiju

Oliviji, Miši, Aci

i mojim Italijanima

Za svu podršku i saradnju tokom različitih perioda zajedničkih studija.

SADRŽAJ

UVOD	iii
1 SUPERPROVODNOST	1
1.1 Otkriće superprovodnosti	1
1.2 Mehanizam superprovodnosti	3
2 ANTIFEROMAGNETNI LA_2CUO_4	5
2.1 Kristalna struktura	5
2.2 Elektronska struktura	8
3 HAJZENBERGOV MODEL ANTIFEROMAGNETIZMA	13
3.1 Habardov hamiltonijan	13
3.1.1 Jako korelisani sistemi	14
3.2 Hajzenbergov hamiltonijan	15
3.3 Osnovno stanje antiferomagneta	16
3.4 Spinski talasi	17
3.4.1 Bozonizacija spinskih operatora	19
3.4.2 Opšta transformacija	20
3.5 Mermin-Vagnerova teorema, spinska anizotropija i Goldstonovi bozoni	23
4 EFEKTIVNI HAMILTONIJAN ZA LA_2CUO_4	25
4.1 Frustrirani magnetizam	25
4.2 Efektivni hamiltonijan frustriranog sistema	26
4.3 Ciklična interakcija	28
5 ANALIZA U OKVIRU TEORIJE LINEARNIH SPINSKIH TALASA	31
5.1 Efektivni hamiltonijan u LSW teoriji	31
5.2 Magnetizacija podrešetke u LSW teoriji	35
5.3 Goldstonov mod u LSW teoriji	35
5.4 Magnonski doprinos specifičnoj topoteti u LSW teoriji	36
6 ANALIZA U OKVIRU SAMOUSAGLAŠENE TEORIJE SPINSKIH TALASA	37
6.1 Efektivni hamiltonijan u SCSW teoriji	37

Sadržaj

6.2 Magnetizacija podrešetke u SCSW teoriji	41
6.3 Magnonski doprinos specifičnoj topotri u SCSW teoriji	42
7 ANALIZA REZULTATA	43
7.1 Magnonski spektar	43
7.2 Magnetizacija podrešetke u osnovnom stanju	52
7.3 Magnonski doprinos specifičnoj topotri	56
8 ZAKLJUČAK	57
A INTEGRACIJA U INVERZNOM PROSTORU	59

UVOD

Iako je prošlo gotovo trideset godina od otkrića visokotemperaturske superprovodnosti u oksidima bakra tipa $\text{La}_{2-x}\text{Ba}_x\text{CuO}_4$ 1986. godine, ova pojava ni danas ne prestaje da zaokuplja pažnju naučne javnosti. To otkriće je bilo značajno za fiziku kondenzovane materije, s obzirom da je rezultovalo brojnim eksperimentalnim izučavanjima ovih novih materijala, kao i pokušajima da se odgonetne poreklo mehanizma pojave superprovodnosti kod istih, i tako pronađe model koji bi mogao da opiše ponašanje ovakvih sistema. To je uslovilo intenzivno istraživanje koje je i danas, posle više decenija, podsticano činjenicom da visokotemperaturska superprovodnost predstavlja izuzetno značajan i intelektualno izazovan problem, a s druge strane otvara mogućnost za brojne tehnološke primene. Uprkos činjenici da je postavljeno nekoliko teorija koje bi trebalo da opisuju pojavu visokotemperaturske superprovodnosti, potraga za novim materijalima ovog tipa je bila i biće u velikoj meri empirijska, budući da jedinstvena teorija koja bi mogla da ukaže na smer razvoja takvih materijala još uvek nije poznata.

Veliki broj eksperimentalnih i teorijskih istraživanja, između ostalog i ovaj rad, posvećen je magnetnim osobinama kristala tipa La_2CuO_4 , tzv. „roditeljskim jedinjenjima“, koja prilikom dopiranja određenim tipom metala prelaze u superprovodno stanje. Naime, superprovodnost se pojavljuje samo u određenim metalnim oblastima blizu izolator-metal prelaza, a kada sistem postane predopiran – superprovodnost nestaje. Ova činjenica prirodno navodi na zaključak da određena specifična elektronska svojstava koja se ispoljavaju u ovoj oblasti mogu biti odgovorna i za mehanizam visokotemperaturske superprovodnosti.

Bakarni oksid La_2CuO_4 i druga roditeljska jedinjenja visokotemperaturskih superprovodnika su Mot-izolatorski slojeviti antiferomagneti sa jakim izmenskim sparivanjem. Smatra se da su CuO_2 ravni od suštinskog značaja za njihove osobine, s obzirom da je dinamika kvantnih spinova ovih ravni ključna za razotkrivanje misterije kuprata. U trodimenzionalnim kupratima kao što je La_2CuO_4 , prisustvo slabog sparivanja između CuO_2 ravni omogućava trodimenzionalno magnetno uređenje sve do temperature $T_N \approx 330\text{ K}$. U pravom dvodimenzionalnom sistemu, s druge strane, termalne spinske fluktuacije narušavaju dugodometno uređenje na

ma kojoj konačnoj temperaturi. Materijali koji sadrže slabo spregnute CuO₂ ravnini su antiferomagnetni izolatori sa veoma velikim Hajzenbergovim energijama izmene, koji postaju visokotemperaturski superprovodnici kada se nosioci nanelektrisanja, tzv. dopanti, dodaju CuO₂ ravnima. Stoga se čini očiglednim da se mehanizam ovog novog oblika superprovodnosti krije u poznavanju fizike ovih slojeva, te odатle i potreba za analizom fizičkih veličina od interesa, što će biti tema ovog rada.

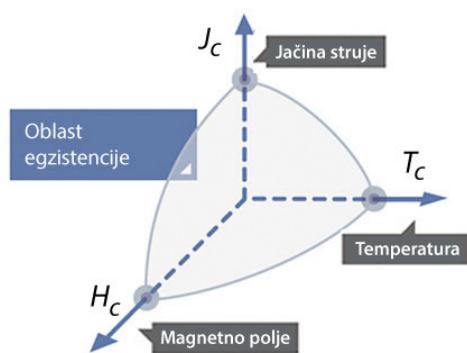
Naime, rad je koncipiran na sledeći način: u *Poglavlju 1* dat je kraći osvrt na fenomen superprovodnosti. *Poglavlje 2* sadrži opis kristalne i elektronske stukture jedinjenja La₂CuO₄, zajedno sa odgovarajućim grafičkim prikazima i modelima koji opisuju mehanizam realizacije električne provodnosti u tom jedinjenju. U *Poglavlju 3* će biti dat pregled magnetnih fenomena koji su značajni za dalje razumevanje ovog rada. Pre svega, dat je osvrt na interakciju izmene uopšte, kao i Hajzenbergov model za antiferomagnet, i, ono što je najbitnije za dalju analizu – uveden je koncept teorije spinskih talasa. *Poglavlje 4* je posvećeno dobijanju efektivnog Hajzenbergovog hamiltonijana, u kojem su sažete dominantne interakcije izmene i koji predstavlja po-laznu tačku za dalju analizu. U *Poglavlju 5* je data analiza u okviru teorije linearnih spinskih talasa, u kojoj su odbačeni članovi višeg reda po magnonskim ekscitacijama, a koji se kasnije analiziraju u *Poglavlju 6* u okviru samousaglašenog pristupa. U *Poglavlju 7* su izvedene magnetne i termodinamičke osobine (magnonski spektar, magnetizacija podrešetke, magnonski ideo u specifičnoj toploti) jedinjenja La₂CuO₄ u oblasti niskih temperatura. Rezultati su upoređeni sa postojećim eksperimentalnim podacima, na osnovu čega je procenjena granica važenja ovih teorija u analizi jedinjenja La₂CuO₄. Naposletku, osnovni zaključci sažeti su u *Poglavlju 8*.

Neke opšte napomene o I Briluenovoj zoni, impulsnom prostoru i inverznoj rešetki date su u *Prilogu A*. Na tom mestu je takođe dat obrazac za prelazak sa sume u impulsnom prostoru na integral. Isti je korišćen prilikom svih numeričkih izračunavanja.

SUPERPROVODNOST

1.1 OTKRIĆE SUPERPROVODNOSTI

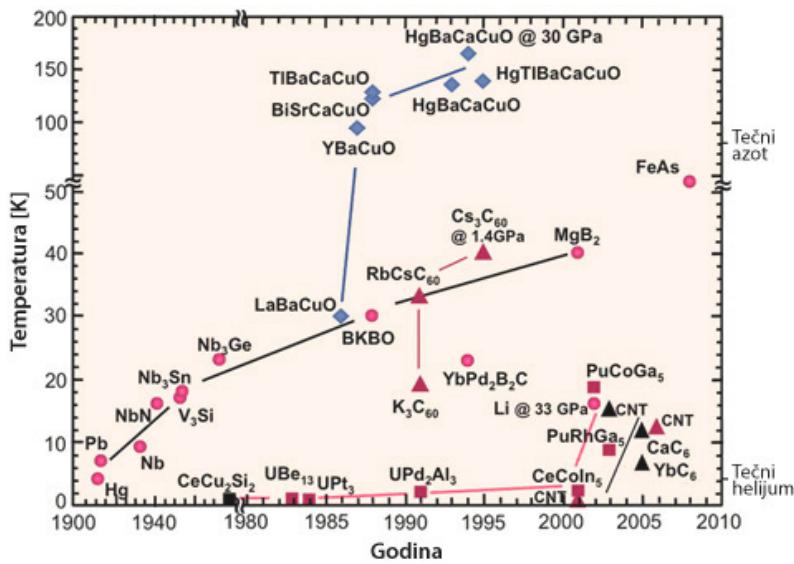
Nakon što je 1908. godine Kamerling Onnes (*Heike Kamerlingh Onnes*) uspešno izvršio likvefakciju helijuma, bio je u mogućnosti da meri električnu otpornost metala na veoma niskim temperaturama. Proučavajući uzorak Hg 1911. godine, Onnes je primetio da se sa smanjenjem temperature otpornost ne smanjuje kontinualno kao što se očekivalo, već je umesto toga, na temperaturi od oko 4,2 K, iznenada padala na nultu vrednost. Ovaj fenomen poznat je kao superprovodnost. Otkriveno je da superprovodnici ispoljavaju i drugi elementi (kao što su Pb, Sn i Al) na kritičnim temperaturama između 4 i 10 K. Činjenica da je ovo stvarno nestajanje otpornosti, a ne samo opadanje ispod vrednosti koja se može eksperimentalno ustanoviti, utvrđena je korišćenjem standardnih voltmetara kojima je potvrđeno postojanje stalne struje u superprovodnom kolu.



Slika 1.: Oblast egzistencije superprovodne faze Uz uslov da temperatura i magnetno polje moraju biti ispod neke kritične vrednosti, postoji i ograničenje na jačinu struje. Tri međusobno zavisne kritične vrednosti, T_c , H_c i J_c , prikazane su na Slici 1: material će ostati u superprovodnom stanju samo za vrednosti parametara u okviru osenčene zapremine.

Druga bitna karakteristika superprovodnika otkrivena je 1933. godine, od strane Majsnera (*Walther Meissner*) i Oksenfelda (*Robert Ochsenfeld*): superprovodnik smešten u spoljašnje magnetno polje istiskiva je iz sebe magnetni fluks na temperaturi ispod kritične. Ovaj fenomen je poznat pod nazivom „savršeni dijamagnetizam“ i označava tzv. Majsnerov efekat.

Ovo otkriće je bilo propraćeno nizom studija, i utvrđeno je da su superprovodne osobine prisutne kod dvadesetak metalnih elemenata i oko hiljadu jedinjenja i legrura na temperaturama ispod kritične. Zastoj u istraživanjima je nastupio u ranim sedamdesetim godinama prošlog veka kada se, nakon otkrića superprovodnosti Nb_3Ge na temperaturama ispod $T_c = 23,2\text{ K}$, a na osnovu određenih teorijskih predviđanja, verovalo da se više vrednosti kritičnih temperatura ne mogu dostići. Ipak, istraživanje Milera (K. Alex Müller) i Bednorca (J. Georg Bednorz) [1], izvedeno sredinom osamdesetih godina na keramičkim oksidima sa perovskitnom kristalnom strukturom, rezultovalo je otkrićem superprovodnosti u keramikama bakarnih oksida (u materijalu La_2CuO_4 dopiranim sa Ba), čak i na temperaturama oko $T_c = 30\text{ K}$. Nekoliko meseci kasnije otkriveno je da se dopiranjem Sr povećava kritična temperatura u ovom jedinjenju (skraćeno nazvanom LMCO, gde se M odnosi na metal kojim se dopira) do blizu 40 K. Pronalazak superprovodne oksidne keramike LMCO predstavlja početak izučavanja visokotemperatrskih superprovodnika; ubrzo su otkriveni i drugi materijali sa mnogo višim kritičnim temperaturama, što je omogućilo korišćenje tečnog azota za hlađenje, koji je mnogo ekonomičniji i jednostavniji za dobijanje nego tečni helijum. Konačno, naučnici su uspeli da sintetišu jedinjenja sa kritičnom temperaturom iznad 130 K. Neka od njih, sa svojim kritičnim temperaturama, prikazana su na *Slici 2.*



Slika 2.: Visokotemperaturski superprovodnici

Eksperimentalno otkriće visokotemperaturskih superprovodnika je bilo praćeno pojavom određenog broja teorijskih modela koji su trebali da opišu njihove suštinske karakteristike. Međutim, jedinstvena teorijska interpretacija još uvek nije data.

1.2 MEHANIZAM SUPERPROVODNOSTI

U običnom provodniku se šupljina stvara kad god se elektron kreće (zbog očuvanja neutralnosti naielktrisanja), što prouzrokuje otpornost. Nasuprot tome, u slučaju superprovodnika imamo neograničen izvor elektrona koji ne stvaraju šupljine za sobom. Ovo je posledica stvaranja tzv. Kuperovih parova u superprovodniku, što se ostvaruje na sledeći način: dok se elektron kreće kroz sistem, on stvara depresiju atomske rešetke usled vibracija rešetke tj. fonona. Ako je depresija rešetke dovoljno jaka, drugi elektron može da upadne u depresiju stvorenu od strane prvog elektrona, tzv. „vodenim krevet“ efekat, čime se formira Kuperov par. Kada ovaj efekat postane dovoljno jak, formiranje Kuperovih parova preovlađuje nad stvaranjem šupljina iza elektrona, te normalni provodnik prelazi u superprovodnik.

Mehanizam superprovodnika je uspešno objašnjen BCS¹ teorijom koja uvodi koncept Kuperovog para, a čija je valjanost i eksperimentalno potvrđena. Međutim, ova teorija predviđa postojanje superprovodnika do T_c oko 30K. Po otkriću visokotemperaturnih superprovodnika, usled nemogućnosti BCS teorije da objasni iste, pristupilo se proučavanju ovih jedinjenja sa teorijskog aspekta, čime su predložene različite teorije koje do danas nisu uspele u potpunosti da objasne pojavu superprovodnosti na visokim temperaturama.

Za sada se veruje da je mehanizam visokotemperaturnih superprovodnika veoma sličan mehanizmu običnih superprovodnika [2]. Osnovna razlika je što je, u ovom slučaju, uloga fonona praktično zamenjena ulogom talasa spinske gustine, od kojih su visokotemperaturni superprovodnici strogo zavisni. Kada se elektron kreće u visokotemperaturnom superprovodniku, njegov spin kreira talas spinske gustine oko njega, što prouzrokuje da susedni elektron „padne“ u spinsku depresiju kreiranu od strane prvog elektrona (ponovo efekat „vodenog kreveta“). Tada se opet formira Kuperov par. Konačno, kada se temperatura sistema snizi, kreira se više talasa spinske gustine, a samim tim i Kuperovih parova. Do superprovodnosti dolazi pri neograničenom stvaranju ovih parova, što označava fazni prelaz. Treba primetiti da u visokotemperaturnim sistemima, koji su magnetni usled Kulonove interakcije, postoji snažno Kulonovo odbijanje među elektronima koje sprečava sparivanje Ku-

¹ BCS teorija predložena je od strane Bardina (John Bardeen), Kupera (Leon Cooper) i Šrifera (John Robert Schrieffer) 1957. godine, i predstavlja prvu teoriju koja je uspela da objasni pojavu superprovodnosti. Prema ovoj teoriji, superprovodnost se objašnjava kao mikroskopski efekat koji nastaje usled pojave kondenzata, pri čemu je kod superprovodnika kondenzat analogan, ali ne i identičan, poznatom Boze-Ajnštajnovom kondenzatu; naime, radi se o kondenzaciji Kuperovih parova umesto pojedinih bozona.

SUPERPROVODNOST

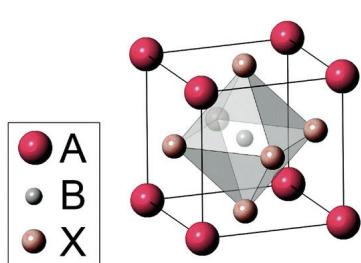
perovih parova na istom čvoru. Kao posledica toga se sparivanje elektrona dešava sa najbližim susednim čvorom, što predstavlja tzv. *d* sparivanje. O ovome će biti više reči u narednom poglavlju.

2

ANTIFEROMAGNETNI La_2CuO_4

Decenijama je poznato da prelazni metalni oksidi ispoljavaju različito egzotično ponašanje. Postoje jedinjenja kod kojih se prelaz izolator-metal javlja u funkciji pritiska ili temperature, drugi koji prelaze iz antiferomagnetsnog izolatora u feromagnetski metal u zavisnosti od dopiranja i mnogi koji ispoljavaju strukturni fazni prelazi. Iako je bilo mnogo uspeha u razvijanju teorije strukturnog faznog prelaza, prelaz izolator-metal i prateća pojava magnetizma ostaju jedni od najvećih nerazrešenih problema fizike kondenzovane materije. Otkriće visokotemperaturske superprovodnosti u ravnima oksida bakra osnažilo je potrebu za razumevanjem izolator-metal prelaza jer se verovalo da iste korelacije koje vode do izolatorskog stanja, a za koje je gustina nosilaca nanelektrisanja mala, takođe vode do superprovodnosti kada je gustina nosilaca nanelektrisanja dovoljno velika. Zbog toga je od značaja proučiti strukturu i osobine ovakvih jedinjenja, počevši od antiferomagnetsnog izolatora.

2.1 KRISTALNA STRUKTURA



Slika 3.: Perovskitna struktura

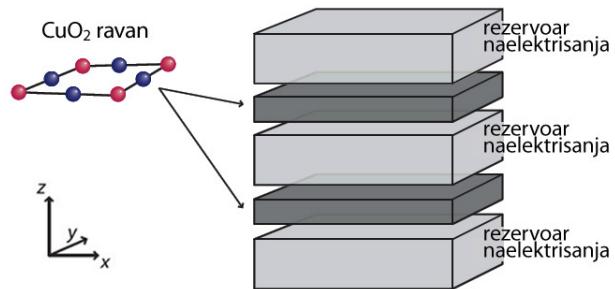
Osnovna gradivna jedinica visokotemperaturnih superprovodnika je perovskitna kristalna struktura [3]. Perovskiti, čija je hemijska formula ABX_3 , kristališu u kubnoj kristalnoj rešetki u kojoj nemetalni anjoni X (obično joni kiseonika) formiraju oktaedar oko nemetalnog katjona B, sa osam takvih oktaedara koji okružuju metalni katjon A

(Slika 3). Tako se struktura superprovodnih oksida bakra može posmatrati kao sačinjena od blokova perovskitne strukture, pomerenih relativno jedan u odnosu na drugi ili umetnutih između različitih slojeva. U tom slučaju se formira CuO_6 oktaedar koji se sastoji od centralnog jona Cu^{2+} i šest O^{2-} jona. Cu atom se javlja u

(0, 0, 0) i $(\frac{1}{2}, \frac{1}{2}, \frac{1}{2})$ čvorovima rešetke jedinične čelije, slične zapreminske centriranoj strukturi.

Zajednički strukturni element superprovodnih oksida bakra je jedna ili više bliskih međusobno paralelnih CuO_2 ravni razdvojenih slojevima drugih atoma (La, O, Ba, Y...). Bakarni atomi su u ovim ravnima raspoređeni u kvadratnoj ili pravougaonoj planarnoj koordinaciji. Eksperimentalno je utvrđeno da kritična temperatura bakarnih oksida zavisi od broja bliskih susednih CuO_2 ravni u tom smislu da ona raste sa povećanjem broja od jedan do tri, gde je utvrđeno da dalje povećaje broja bliskih CuO_2 ravni vodi do saturacije u porastu kritične temperature. U slučaju La_2CuO_4 postoje dve CuO_2 ravni, koje se nalaze na međusobnom rastojanju od približno 0,66 nm, razdvojene jedna od druge sa dva nemagnetna LaO sloja. Slojevi koji razdvajaju CuO_2 ravni primaju elektrone iz ovih ravnih (i obrnuto), pa oni postaju elektronski aktivni, tj. zadobijaju provodnost šupljinskog (p) (ili elektronskog (n)) tipa. Ovi slojevi se stoga nazivaju „rezervoarima nanelektrisanja“ (Slika 4).

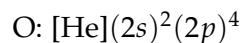
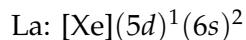
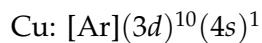
Na osnovu gore rečenog, smatra se da je pojava superprovodnosti značajno povezana sa procesima koji se odigravaju u CuO_2 ravnima visokotemperaturnih superprovodnika, pa je problem proučavanja njihove strukture obično pogodnostavljen ograničenjem na 2D, tj. analizom CuO_2 ravni.



Slika 4.: Slojevita struktura oksida bakra sa CuO_2 ravnima i „rezervoarima nanelektrisanja“

Druga značajna karakteristika superprovodnih bakarnih oksida je antiferomagnetsko dugodometno uređenje nedopiranih jedinjenja. Antiferomagnetsko uređenje [4] podrazumeva (po Nelu (Louis Eugène Félix Néel)) skup dve ili više različito orijentisane feromagnete podrešetke, gde su najbliži susedi smešteni u čvorovima koji pripadaju različitim podrešenkama. Prilikom dopiranja (u slučaju La_2CuO_4 sa Ba, Ca ili Sr) takvo dugodometno uređenje spinova biva uništeno. Ipak, eksperimenti izvršeni neelastičnim neutronskim rasejanjem [5] su pokazali da se i u superprovodnoj fazi održava kratkodometno uređenje spinova. S obzirom na to da se antiferomagnetsne korelacije javljaju i u superprovodnoj fazi, antiferomagnetizam ovih jedinjenja često se povezuje sa njihovom superprovodnošću, te je velik broj radova posvećen upravo izučavanju magnetnih osobina „roditeljskih“ jedinjenja visokotemperaturnih superprovodnih bakarnih oksida.

Na ovom mestu je zgodno razmotriti elektronske konfiguracije elemenata koji obrazuju ovo jedinjenje:



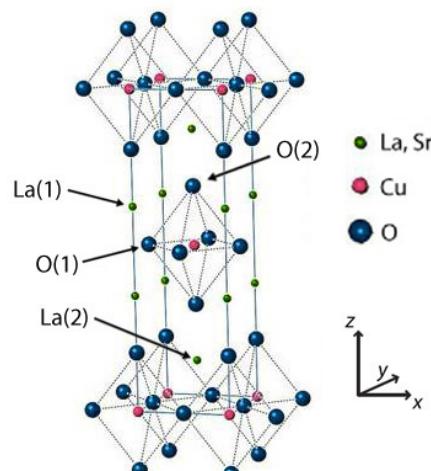
U kristalu se lantan nalazi u La^{3+} stanju koje odgovara stabilnoj konfiguraciji ksenona, kiseonik u O^{2-} stanju kojem odgovara popunjena p ljuska, a bakar, s obzirom da se mora očuvati električna neutralnost, mora biti u Cu^{2+} stanju.

Treba istaći da se u slučaju La_2CuO_4 metalno stanje postiže supstitucijom trivalentnog jona lantana (La^{3+}) dvovalentnim stroncijumom (Sr^{2+})¹, što vodi do prelaza elektrona iz CuO_2 ravni u „rezervoar nanelektrisanja“. Tačnije, p ljuška oksidnog jona O^{2-} prelazi u O^- stanje sa jednom šupljinom u p ljuisci. Treba još napomenuti da su La^{3+} i Sr^{2+} veliki joni, te stoga formirana jedinjenja imaju formulu A_2BO_4 .

Veliki broj ispitivanja izvršenih X-zracima, elektronskom i neutronskom difrakcijom [6,7] na visokotemperaturskim superprovodnicima, koji su bili podvrgnuti supstituciji u različitim procentima supstituenta, pokazuje da ovi supstituenti zauzimaju određene položaje u kristalnim jediničnim celijama [8], pri čemu su supstituisani joni takođe distribuirani na približno uniforman način u celom superprovodnom uzorku.

Za jedinjenje La_2CuO_4 postoje dva položaja sa kojih La atom može da bude supstituisan (*Slika 5*): jedan od njih je položaj jednog od osam La atoma oko Cu–O oktaedra i ta pozicija se označava kao La(1); druga mogućnost je jedan od položaja iznad i ispod Cu–O oktaedara, gde je taj položaj označen kao La(2). Mnogobrojna istraživanja su dovela do zaključka da supstituisani atom zauzima položaj La(1), mada ne postoji relevantan dokaz za takvu prepostavku [8].

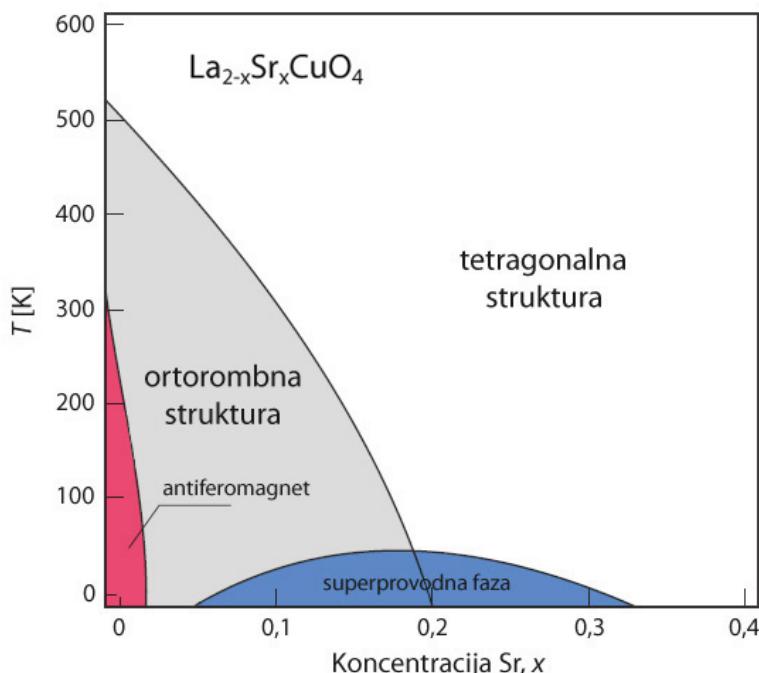
Prilikom dopiranja jedinjenja La_2CuO_4 sa Sr dolazi do nekoliko faznih prelaza usled interakcije izmene [9] između spinova bakarnih jona i spinova novonastalih šupljina. Promene koje se dešavaju pri dopiranju mogu se pratiti na *Slici 6*: roditeljsko



Slika 5.: Struktura La_2CuO_4

¹ Najinteresantnije jedinjenje je ono sa Sr zato što pokazuje najviše vrednosti kritične temperature.

jedinjenje La_2CuO_4 je antiferomagnetni izolator. Povećanjem koncentracije šupljina dolazi do brzog raspada antiferomagnetskog uređenja, koje nestaje na koncentraciji od svega $p = 0,02$. Daljim povećanjem koncentracije Sr ($p = 0,04$) $\text{La}_{2-x}\text{Sr}_x\text{CuO}_4$ prelazi u metalno stanje. Za koncentraciju Sr u opsegu $0,05 \leq p \leq 0,30$, na niskim temperaturama, dolazi do pojave superprovodnog stanja. Maksimalna vrednost kritične temperature $T_c^{max} = 38\text{ K}$ odgovara tzv. „optimalnoj“ koncentraciji Sr od oko $p = 0,15$.



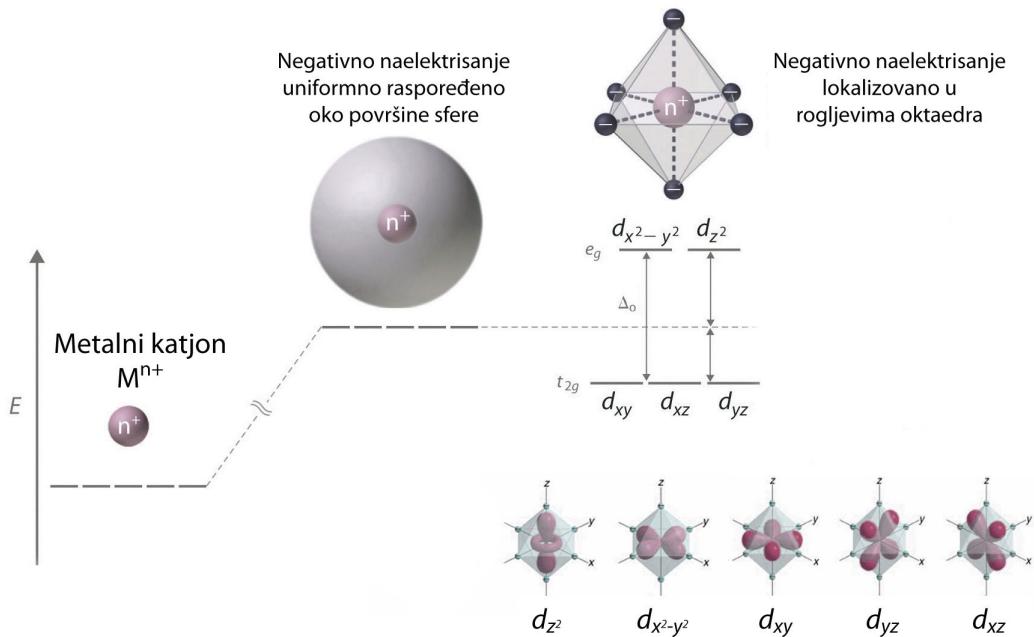
Slika 6.: Fazni dijagram La_2CuO_4 u zavisnosti od koncentracije stroncijuma [9]

Sa dijagrama (Slika 6) se vidi da na temperaturama iznad $T_{sr} = 530\text{ K}$ jedinjenje La_2CuO_4 kristališe u tetragonalnom kristalografskom sistemu, sa konstantama rešetke $a_t = b_t \simeq 0,378\text{ nm}$ i $c_t \simeq 1,32\text{ nm}$ [9]. Pri snižavanju temperature usled zakretanja CuO_6 oktaedara oko odgovarajuće ose simetrije u CuO_2 ravni dolazi do strukturnog prelaza iz tetragonalne u ortorombnu kristalnu strukturu, sa konstantama rešetke $a_o = 0,534\text{ nm}$, $b_o = 0,541\text{ nm}$ i $c_o \simeq 1,314\text{ nm}$ [5, 10].

2.2 ELEKTRONSKA STRUKTURA

Već je rečeno da se bakarni joni nalaze u centru oktaedara sačinjenih od kiseonikovih jona, što znači da je svaki jon bakra okružen sa šest jona kiseonika: četiri u ravnini, O(1), i dva duž z -ose, O(2) ili tzv. apiksni kiseonici. Pored toga, rasto-

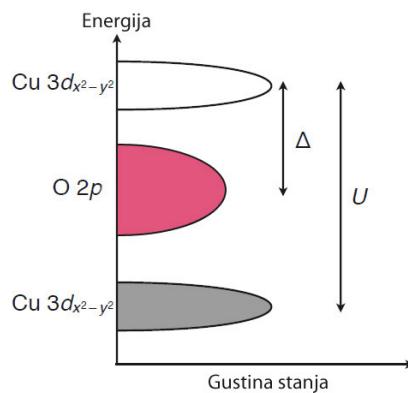
janje između bakra i kiseonika u ravni iznosi približno $0,19\text{ nm}$, a u pravcu z -ose približno $0,24\text{ nm}$, pa je samim tim oktaedar izdužen u z -pravcu. Izduženje ovog oktaedra može se objasniti analiziranjem elektronske strukture CuO_2 ravni. Naime, u izolatorskom stanju $3d$ podljuska bakra sadrži (približno) devet elektrona, dok su okolni joni kiseonika u $2p^6$ konfiguraciji, tako da imaju nanelektrisanje $-2e$. Ovo stvara kristalno polje koje razdvaja Cu $3d$ stanja, koja se cepaju na podnivoe zbog interakcije sa kristalnim (ligandnim) poljem. U polju sferne simetrije energija $3d$ nivoa je petostruko degenerisana, ali se u polju kubne simetrije petostruki $3d$ nivo cepa na t_{2g} triplet niže i e_g dublet više energije (Slika 7). e_g orbitale su orijentisane ka negativno nanelektrisanim jonom kiseonika, pa stoga imaju veću Kulonovu energiju od t_{2g} orbitala (koje su usmerene suprotno od jona kiseonika). Pri smanjenju simetrije od kubne do tetragonalne, triplet se cepa na dublet niže i singlet više energije, a dublet na dva singleta. Smanjenje energije koje nastaje pri skidanju degeneracije tog dubleta (efekat Jana-Telera) daje značajan doprinos [9] u izduženju CuO_6 oktaedara u posmatranom jedinjenju. U La_2CuO_4 , na primer, šupljina u $3d$ podljusci popunjava $3d_{x^2-y^2}$ orbitalu u osnovnom stanju; energija $3d_{z^2}$ orbitale se smanjuje jer je njena Kulonova interakcija sa apeksnim jonom kiseonika (tj. onima duž z -ose) smanjena.



Slika 7.: Razdvajanje d orbitala u kristalnom polju okolnih kiseonikovih jona

Nedopirana jedinjenja nisu klasični izolatori iz zonske teorije, već tzv. Mot-izolatori [11]. Cu^{2+} joni sadrže devet $3d$ elektrona od maksimalnih deset, što znači da je orbitala sa najvišom energijom polupopunjena, a to je u tetragonalnom kristalnom

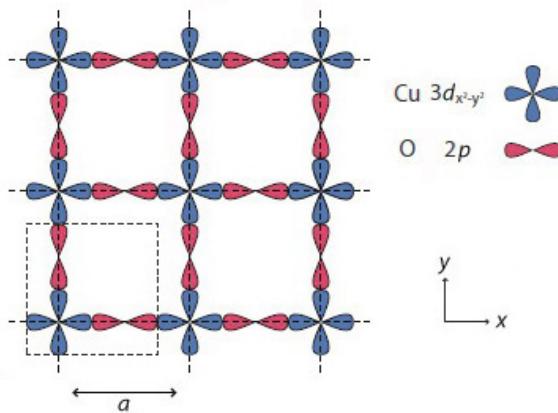
Slika 8: Šematski prikaz gustine stanja u trozonskom Habardovom modelu. Cu $3d_{x^2-y^2}$ zona se razdvaja na gornju i donju Habardovu zonu za iznos U što predstavlja Kulonovo odbijanje. Popunjena O $2p$ zona se nalazi unutar Motovog procepa, na udaljenosti Δ od gornje Habardove zone.



polju $3d_{x^2-y^2}$ orbitala [12]. Kako svaka $3d_{x^2-y^2}$ orbitala sa sobom nosi po jedan elektron, prekrivanjem izolovanih orbitala se dobija energijska zona. Valentna zona je polupotpunjena, i za očekivati je da se kristal ponaša kao provodnik. Ipak, La_2CuO_4 je ustvari antiferomagnetni izolator. Ovo demonstrira značaj elektron-elektron korrelacija oksida bakra, usled kojih su šupljine lokalizovane na atomima bakra. U Motovom izolatoru su, dakle, nosioci nanelektrisanja jako lokalizovani, i potreban je određeni iznos energije U kako bi se dva nosioca nanelektrisanja, uprkos Kulonovog odbijanja, našla na istom čvoru. Stoga su nosioci nepokretni, te je sistem izolatorskog tipa. U zonskoj slici, polupotpunjena zona se razdvaja na popunjenu donju Habardovu zonu i praznu gornju Habardovu zonu, sa energijskom procepom U . Stanja sa nižom energijom su rezervisana za već postojeće elektrone matičnog atoma koji pojedinačno okupiraju određeni čvor, dok višu energijsku zonu popunjavaju elektroni koji dospevaju na pomenuti čvor zauzet od strane prvog elektrona. U ovakvoj zonskoj slici Fermijev nivo se nalazi između dve novonastale podzone, pa kristal prelazi iz metalne u fazu Mot-izolatora.

Situacija kod kuprata je nešto složenija usled prisustva O^{2-} jona i njihovih valentnih orbitala. Tačnije, orbitale od interesa su $2p_x$ i $2p_y$, odnosno orbitale unutar ravni koje leže duž Cu–O–Cu pravca, koje će u daljem tekstu biti kraće označene sa $2p$. Orbitale O $2p$ i Cu $3d_{x^2-y^2}$ su prikazane na Slici 9. Energijski nivo O $2p$ zone se nalazi između gornje i donje Habardove zone Cu $3d_{x^2-y^2}$ orbitala. Drugim rečima, lakše je otkloniti jedan elektron sa popunjениh oksidnih orbitala nego otkloniti elektron sa polupotpunjene orbitali bakra. Tačnije, u kupratnim sistemima energijski utrošak za postojanje druge šupljine u Cu d orbitali je mnogo veći od energije razdvajanja između Cu $d_{x^2-y^2}$ i O p orbitala. Fermijeva energija se nalazi između kiseonikove $2p$ zone i gornje Habardove zone, čije razdvajanje se naziva procep prenosa nanelektrisanja Δ , tj. energija koja je potrebna za prenos elektrona sa O^{2-} ion na Cu^{2+} ion.

Nedopirani kuprati se stoga opravdano nazivaju izolatorskim prenosiocima nanelektrisanja. Veruje se da trozonski Habardov model (jedna orbitala bakra, $3d_{x^2-y^2}$, i dve kiseonikove orbitale, $2p_x$ i $2p_y$) sadrži sve niskoenergijske elektronske interakcije od interesa unutar CuO_2 ravni [2]. Kako je ovaj model složen, mnogi teoretičari koriste jednozonski Habardov model, o kojem će biti više reči u narednom poglavlju.



Slika 9.: O $2p$ i Cu $3d_{x^2-y^2}$ orbitale sa prikazom integrala izmene između spinova sa Cu $3d_{x^2-y^2}$ orbitale

Kristalna struktura sugerira da je Cu^{2+} sa $S = \frac{1}{2}$ u orbitalnom nedegenerisanom stanju snažno hibridizovan sa p nivoima okolnih kiseonika, što je u skladu sa stechiometrijskim podacima za izolatorsko jedinjenje La_2CuO_4 . To znači da svaki Cu atom gubi dva elektrona, jedan $4s$ i jedan $3d$ elektron, pa tako u $3d$ ljesci (tačnije $d_{x^2-y^2}$ orbitali) preostaje jedna šupljina sa spinom $S = \frac{1}{2}$. Spinovi nepopunjene d ljeske, koji su lokalizovani

na čvorovima kristalne rešetke, formiraju magnetnu rešetku; oni su međusobno povezani kvantno-mehaničkim silama izmene koje odgovaraju integralima izmene J . Eksperiment sa difrakcijom elektrona je pokazao da su spinovi u okviru CuO_2 ravni antiferomagnetskom uređenju [5].

Dugodometno antiferomagnetsko uređenje postoji unutar temperaturskog intervala od apsolutne nule do Nelove temperature, iznad koje je sistem paramagnetan. Nelova temperatura za jedinjenje La_2CuO_4 je određena neutronskom difrakcijom i iznosi $T_N \approx 325 \pm 5 \text{ K}$ [13, 14].

3

HAJZENBERGOV MODEL ANTIFEROMAGNETIZMA

Kako u kristalu dolazi do prekrivanja elektronskih orbitala susednih atoma, kao rezultat se javlja interakcija izmene što, prema savremenim shvatanjima, vodi ka magnetnom uređenju u kristalima. Sama Kulonova interakcija ne zavisi od orientacije spina, ali u kombinaciji sa Paulijevim principom može da prouzrokuje pojavu dugodometnog uređenja [15, 16]. Usko povezana sa pojmom antiferomagnetizma je izolatorska faza kristala. U slučaju Mot-izolatora, koji predstavljaju tzv. jako korelisane sisteme, spin elektrona dolazi do izražaja i javlja se antiferomagnetsko uređenje. Ovoj klasi jedinjenja pripadaju i oksidi bakra čiji joni poseduju polupopunjene $3d$ elektronske ljske.

Polazeći od Habardovog modela za opis Motovog izolatora, dolazi se do Hajzenbergovog modela, koji je imao velikog uspeha u objašnjenju magnetnih fenomena i srodnih fizičkih pojava, ali je najvažniju primenu našao u objašnjenju magnetnih izolatora. Iako još uvek nije poznata opšta teorija za egzaktno rešavanje feromagnetskih (FM) i antiferomagnetskih (AFM) $2D$, odnosno $3D$ sistema na konačnim temperaturama, teorija spinskih talasa u slučaju Hajzenbergovog modela predstavlja jednu od najkorisnijih metoda za aproksimaciju osnovnog i pobuđenih stanja, koja će biti opisana u radu i primenjena na slučaj antiferomagnetskog jedinjenja La_2CuO_4 .

3.1 HABARDOV HAMILTONIJAN

Prepostavimo da su u kristalu jonski ostaci smešteni na rastojanjima znatno većim od Borovog radijusa provodnog elektrona. Tada su talasne funkcije elektrona vezane za jonske ostatke koji predstavljaju čvorove rešetke. Navedeni opis predstavlja model jake veze [17, 18], prema kom elektroni sa konačnom verovatnoćom mogu da preskoče sa jednog na drugi čvor, s tim što treba voditi računa da postoji Kulonovo odbijanje između dva elektrona na istom čvoru. U slučaju kada je preklapanje orbitala između

elektrona slabo, u račun ulaze doprinosi samo najbližih suseda¹. Dakle, polazeći od aproksimacije jake veze, može se formulisati Habardov model [15, 19–22], koji predstavlja osnovni model teorije magnetizma. Eksplicitan oblik Habardovog hamiltonijana dat je u prethodnom odeljku, ali ga je na ovom mestu zgodno još jednom zapisati u cilju dalje analize:

$$\hat{H} = \sum_{n,m} \sum_{\sigma} t_{nm} \hat{c}_{n,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{m,\sigma} + U \sum_m \hat{n}_{m,\uparrow} \hat{n}_{m,\downarrow}. \quad (3.1)$$

U gornjem izrazu U predstavlja intenzitet Kulonove interakcije između dva elektrona na istom čvoru m , a $t_{nm} = t(n - m)$ je proporcionalno efektivnom preklapanju talasnih funkcija susednih atoma i predstavlja amplitudu verovatnoće prelaska elektrona sa čvora n na čvor m kristalne rešetke. Fermi operator $\hat{c}_{m,\sigma}^{\dagger}$ ($\hat{c}_{m,\sigma}$) kreira (anihilira) elektron na čvoru m sa projekcijom spina $\sigma = \uparrow, \downarrow$, dok operator $\hat{c}_{m,\sigma}^{\dagger} \hat{c}_{m,\sigma} = \hat{n}_{m,\sigma}$ predstavlja operator broja elektrona (0 ili 1) sa spinom $\sigma = \uparrow, \downarrow$ na čvoru m .

Prvi član u (3.1) predstavlja kinetičku energiju, odnosno preskok elektrona sa čvora n na čvor m kristalne rešetke. Pošto se ovaj član hamiltonijana dijagonalizuje Blohovim funkcijama, može se reći da on interpretira elektrone kao talase [20]. Drugi član je dijagonalan u Vanijeovoj reprezentaciji i predstavlja Kulonovu interakciju dva elektrona koji se nalaze na istom čvoru m . Kako Paulijev princip zabranjuje postojanje dva elektrona istih spinova u istom okupacionom stanju, jasno je da ova dva elektrona moraju biti suprotnih spinova. Ovakav pristup ističe čestična svojstva elektrona: opisuje ih kao čestice koje „žive“ na pojedinim čvorovima rešetke [15, 20, 21].

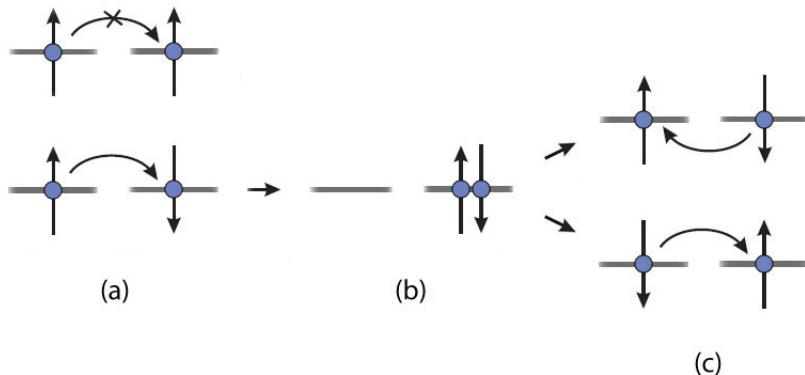
U opštem slučaju, Habardov model je složen za teorijsku analizu. Međutim, postoje dva granična slučaja u kojima je analiza ovog modela pojednostavljena. Slučaj kada je $\frac{U}{t_{nm}} \ll 1$ predstavlja granicu slabe Kulonovske interakcije, koja se može smatrati za malu perturbaciju. To omogućava primenu standardnog perturbacionog računa, u kojem se kao polazište uzimaju ravni talasi (tj. slobodni elektroni). Drugi slučaj, $\frac{t_{nm}}{U} \ll 1$, predstavlja granicu jake Kulonove interakcije, i njemu će biti posvećeno više pažnje u daljem tekstu.

3.1.1 Jako korelisani sistemi

Razmotrimo već pomenuti specijalan slučaj Habardovog modela, tzv. polupopunjeni Habardov model [21] (kada je $N_e = N$, tj. osnovno stanje sadrži po jedan

¹ U opštem slučaju se atomske orbitale različitih čvorova preklapaju, pa se u tom slučaju za opis lokализovanih elektrona koriste Vanijeove funkcije [18, 20].

nespareni elektron po čvoru), pri veoma jakoj Kulonovoj interakciji $\frac{t_{nm}}{U} \ll 1$. U tom slučaju je U dominantan član – dakle, za dovođenje drugog elektrona suprotnog spina na čvor na kom već postoji jedan elektron potreban je iznos energije U , te je stoga otežan prelazak elektrona sa čvora na čvor. Tada ne dolazi do dvostrukog zaposeduća osnovnog stanja, pa su stoga spin-spin interakcije moguće. Takav model opisuje jako korelisan sistem.



Slika 10.: Efekat superizmene [17]: elektroni paralelnih spinova (a) ne učestvuju u virtuelnim procesima, koji su ostvareni kod elektrona sa suprotnim spinovima koji preskakanjem na susedne atome snižavaju svoju kinetičku energiju (b). Na kraju procesa, spinovi elektrona mogu zadržati istu orientaciju ili može doći do zamene orientacije spinova (c).

Dovoljno je razmotriti slučaj između dva susedna čvora (*Slika 10*): kada su spinovi paralelni, Paulijev princip isključenja zabranjuje dvorstruko zaposeduće, dok u slučaju antiparalelnih spinova, elektron može da preskače sa čvora na čvor. U ovom slučaju postoji dodatan utrošak energije U , koji utiče na to da je ovo stanje kratkoživeće. To rezultuje time da bilo koji od spinova, \uparrow ili \downarrow , može preskočiti (nazad) na prazan čvor. U prvom slučaju se ništa značajno nije dogodilo, ali su u drugom slučaju \uparrow i \downarrow spinovi zamenili mesta. Ovaj proces se prema Andersonu naziva superizmenom [20, 23]. U graničnom slučaju $\frac{t_{nm}}{U} \ll 1$ Anderson je razvio hamiltonijan upravo za spinove sa efektivnim sparivanjem $J_{nm} = 4 \frac{t_{nm}^2}{U}$, koji se još naziva antiferomagnetni Hajzenbergov model.

3.2 HAJZENBERGOV HAMILTONIJAN

Jedan od najjednostavnijih mikroskopskih modela magnetizma zasniva se na Hajzenbergovom hamiltonijanu [20]. U ovom modelu, energija interakcije između dva susedna spina je jednostavno:

$$E = J \mathbf{S}_1 \cdot \mathbf{S}_2,$$

gde je J konstanta izmene koja predstavlja jačinu magnetne izmene, a S_i ($i = 1, 2$) je vektorski operator i -tog spina. Da bi se dobila ukupna energija sistema, treba sumirati po svim spinovima sistema:

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\langle n, m \rangle} J_{n,m} \hat{\mathbf{S}}_n \cdot \hat{\mathbf{S}}_m , \quad (3.2)$$

gde je $\hat{\mathbf{S}}_n$ operator spina na čvoru n ili $\hat{\mathbf{S}}_n = (\hat{S}_n^x, \hat{S}_n^y, \hat{S}_n^z)$. Veličina $J_{n,m} = J_{n-m}$ je izmenska interakcija spinova koja u homogenoj rešetki zavisi od rastojanja između čvorova $|n - m|$. Spinovi se orijentisu duž spoljašnjeg polja i za ovu osu orijentacije spinova, ili češće, osu kvantizacije, bira se z -osa Dekartovog sistema koordinata.

Izmena za spinove najbližih suseda energetski dominira, pa je osnovno stanje ili feromagnetsko (svi spinovi paralelni) ili antiferomagnetsko (susedni spinovi antiparalelni). Obično se energije interakcija određuju fitovanjem eksperimentalnih rezultata. Usled njegove jednostavnosti, Hajzenbergov model se često koristi kao početna tačka za fitovanje podataka.

Kao što je već rečeno, spinovi u slučaju jedinjenja La_2CuO_4 su antiparalelno orijen-tisani [5]. Ta činjenica je u efektivnom hamiltonijanu naglašena kroz uslov $J_{nm} > 0$, koji forsira antiferomagnetsko uređenje što u ovom slučaju snižava energiju sistema. Sa porastom temperature, odstupanje od uređene konfiguracije se sve više povećava i na kritičnoj temperaturi (Nelova temperatura, T_N) kristal prelazi u para-fazu [20, 24].

3.3 OSNOVNO STANJE ANTIFEROMAGNETA

Prema definiciji, antiferomagnet je sistem koji se sastoji od dve (ili više) podrešetki, tako da najbliži susedi pripadaju različitim podrešetkama [20, 21]. Neka spinovi sa a pod-rešetke dominantno pokazuju u $+z$, a spinovi sa b podrešetke u $-z$ pravcu. Radi kasnije analize u okviru teorije spinskih talasa, pogodno je hamiltonijan (3.2) izraziti pomoću \hat{S}^\pm operatora. U tom cilju zapišimo hamiltonijan (3.2) u obliku

$$\hat{H} = \frac{1}{2} \sum_{\langle n, m \rangle} J_{n,m} (\hat{S}_n^x \hat{S}_m^x + \hat{S}_n^y \hat{S}_m^y + \hat{S}_n^z \hat{S}_m^z) , \quad (3.3)$$

gde oznaka $\langle n, m \rangle$ predstavlja sumiranje preko najbližih suseda. Operatore \hat{S}^x i \hat{S}^y izrazićemo preko operatora \hat{S}^\pm , definisanih relacijama

$$\hat{S}_n^+ = \hat{S}_n^x + i\hat{S}_n^y, \quad \hat{S}_n^- = \hat{S}_n^x - i\hat{S}_n^y . \quad (3.4)$$

Uvrštavanjem (3.4) u jednačinu (3.3), ograničavajući se na interakciju najbližih suseda (koji pripadaju različitim podreštkama, a odnosno b), dobija se hamiltonijan:

$$\hat{H} = J \sum_{\langle n,m \rangle} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^{+(a)} \hat{S}_m^{-(b)} + \hat{S}_m^{+(b)} \hat{S}_n^{-(a)} \right) + \hat{S}_n^{z(a)} \hat{S}_m^{z(b)} \right]. \quad (3.5)$$

Konfiguracija u kojoj svi spinovi a podrešetke leže duž $+z$ pravca, a spinovi b podrešetke duž $-z$ pravca predstavlja osnovno stanje klasičnog antiferomagneta i naziva se Nelovo stanje [4, 17]

$$|\psi\rangle^N = \prod_{n \in a} |S, S^z = S\rangle_n \prod_{m \in b} |S, S^z = -S\rangle_m.$$

Analiza u pristupu spinskih talasa, pojednostavljuje se u slučaju postojanja jedinstvene ose kvantizacije. Ovo se može postići unitarnom transformacijom [4, 23], koja se sastoji u rotaciji b podrešetke oko x -ose za 180° :

$$\hat{S}_m^{\pm(b)} \rightarrow \hat{S}_m^{\mp(b)}, \hat{S}_m^{z(b)} \rightarrow -\hat{S}_m^{z(b)}. \quad (3.6)$$

Koristeći (3.6), hamiltonijan (3.5) prelazi u

$$\hat{H} = J \sum_{\langle n,m \rangle} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_n^{+(a)} \hat{S}_m^{+(b)} + \hat{S}_m^{-(a)} \hat{S}_n^{-(b)} \right) - \hat{S}_n^{z(a)} \hat{S}_m^{z(b)} \right]. \quad (3.7)$$

dok se za Nelovo stanje dobija

$$|\psi\rangle^N = \prod_{n \in a} |S, S^z = S\rangle_n \prod_{m \in b} |S, S^z = S\rangle_m.$$

U novom, tzv. lokalnom koordinatnom sistemu ², Nelovo stanje izgleda kao feromagnetno. Međutim, članovi $\hat{S}_n^{-(a)} \hat{S}_m^{-(b)}$ ukazuju da Nelovo stanje nije osnovno stanje Hajzenbergovog antiferomagneta. Pravo osnovno stanje AFM nije poznato – ono se odlikuje kvantnim fluktuacijama (odstupanjima od Nelovog stanja) [21, 25], koje se, usled strukture hamiltonijana (3.7), prenose kroz celu rešetku. S druge strane, postoji dobro slaganje između predviđanja teorije spinskih talasa i eksperimentalnih vrednosti za magnonski spektar (videti *Poglavlje 7*), te je opravdano osnovno stanje AFM zameniti Nelovim uz određene pretpostavke (o čemu će biti reči kasnije).

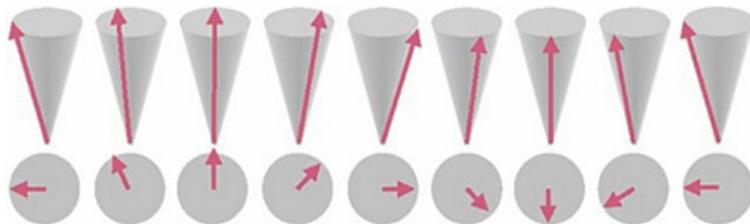
3.4 SPINSKI TALASI

Kvaziklasična teorija (antiferomagnetnih) spinskih talasa [4] se zasniva na ideji da je prelazak sa klasičnog limita ($S \rightarrow \infty$) na konačne (čak i male) vrednosti spinova

² Nadalje će sve jednačine biti napisane u lokalnom koordinatnom sistemu.

moguć, a da pri tome dugodometno uređenje opstaje uprkos kvantnim fluktuacijama. Naime, osnovno stanje (koje je u slučaju AFM nepoznato) možemo aproksimirati klasičnim Nelovim stanjem, a potom odrediti fluktuacije oko tog stanja. Iako klasično Nelovo stanje antiferomagneta (Nelovo stanje) nije svojstveno stanje hamiltonijana kao što je to slučaj kod feromagneta, pristup u okviru spinskih talasa se smatra korisnom tehnikom u slučaju uređenog sistema. Čak i kada je uređenje na makroskopskom nivou zabranjeno usled velikih fluktuacija³, moguće je zadržati lokalno uređenje i primeniti izmenjenu teoriju spinskih talasa [26].

Najjednostavniji način na koji je moguće realizovati pobuđenje je preokrenuti smer jednog od spinova. Ali, u ovom ovom slučaju bi utrošak energije bio veoma veliki ($12J$ za kubnu rešetku, što je najviša energija ekscitacije koja može da se napravi). Mnogo manje vrednosti za energiju ekscitacije se dobijaju ako se preokret jednog spina podeli sa drugim spinovima. Klasično, ako se dopusti da spin precesira oko svoje ose, spinski talas se može interpretirati kao konstantna fazna razlika među precesijama susednih spinova (*Slika 11*)⁴.



Slika 11.: Ilustracija precesiranja spinskog talasa oko pravca delovanja spoljašnjeg magnetnog polja

Dakle, na osnovu gore rečenog može se zaključiti da magnetno pobuđenje, tzv. magnon, nastaje prilikom smanjenja projekcije spina za jedan

$$S_n^z = S \rightarrow S_n^z = S - 1,$$

pri čemu se ta eksitacija dalje prostire kroz kristal u vidu spinskih talasa. Ovako definisan magnon je bozonska kvazičestica, te je za uvođenje pojma spinskog talasa potrebno spinske operatore u Hajzenbergovom hamiltonijantu napisati pomoću Boze-operatora. Stoga definišemo operator $\hat{n}_n^{(\alpha)}$ ($\alpha = a, b$, u zavisnosti od podrešetke koja

³ Npr. Mermin-Vagnerova teorema ne dozvoljava dugodometno uređenje za jedno- i dvodimenzione izotropne Hajzenbergove magnete sa konačnim dometom i na konačnim temperaturama.

⁴ Takođe, može se uzeti u obzir i magnetna anizotropija sistema, kako u realnom spinskom sistemu momenti teže da se orijentisu duž jednog određenog kristalografskog pravca. Ovaj određeni pravac se naziva osa lake magnetizacije, i predstavlja energiju koja je potrebna za rotiranje spina oko ove ose.

se posmatra) koji na datom čvoru meri odstupanje spina od Nelove konfiguracije, pa se dobija relacija:

$$\hat{S}_{\mathbf{n}_\alpha}^z = S - \hat{n}_{\mathbf{n}}^{(\alpha)}, \quad \hat{n}_{\mathbf{n}}^{(\alpha)} = \hat{\alpha}_{\mathbf{n}}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}} \quad (\alpha = a, b), \quad (3.8)$$

gde je $\hat{\alpha}_{\mathbf{n}}^\dagger$ ($\hat{\alpha}_{\mathbf{n}}$) Boze-operator koji kreira (anihilira) kvant pobuđenja lokalizovanog spina na datoj podrešetki. Zamena spinskih operatora \hat{S}^+ i \hat{S}^- bozonskim operatorima $\hat{\alpha}_{\mathbf{n}}^\dagger$ i $\hat{\alpha}_{\mathbf{n}}$ u hamiltonijanu (3.7) može biti ostvarena različitim reprezentacijama. Prethodno je zgodno pozabaviti se opštim karakteristikama spinskih i bozonskih operatora, kao i samim uslovima bozonizacije.

3.4.1 Bozonizacija spinskih operatora

Prednost pristupa u okviru bozonizacije spinskih operatora je dobro poznata statistika bozonskih stepeni slobode. Takođe, Boze-operatori imaju znatno jednostavnije komutacione relacije, a Furije transformacija je u ovom slučaju kanonska, što znači da Furije transformacija bozonskih operatora zadovoljava iste komutacione relacije kao i sami Boze-operatori.

Hamiltonian (3.2) sadrži komponente spinskih operatora sa svih čvorova rešetke, za koji zadovoljavaju komutacione relacije ⁵

$$[\hat{S}_{\mathbf{n}}^\alpha, \hat{S}_{\mathbf{m}}^\beta] = \hat{S}_{\mathbf{n}}^\alpha \hat{S}_{\mathbf{m}}^\beta - \hat{S}_{\mathbf{m}}^\beta \hat{S}_{\mathbf{n}}^\alpha = i\epsilon_{\alpha\beta\gamma} \hat{S}_{\mathbf{n},\mathbf{m}}^\gamma. \quad (3.9)$$

Za svaki od N čvorova rešetke može se definisati Hilbertov potprostor, tako da je bazis za, recimo, Hilbertov prostor u čvoru \mathbf{n} dat kao $\{|S_n^2, S_n^z\rangle\}$. Ovde je $S = \frac{1}{2}, 1, \frac{3}{2}, \dots$ ukupni spin, a $m = -S, \dots, +S$ predstavlja diskretan kvantni broj operatora \hat{S}_n^z na čvoru \mathbf{n} .

U kristalnom sistemu, kao što je La_2CuO_4 , imamo konačan ukupan broj spinova. S obzirom da pojedinačni Hilbertovi potprostori imaju dimenzionalnost

$$\dim \mathcal{H}_i = (2S + 1),$$

ukupan Hilbertov prostor, \mathcal{H} , dat je kao direktni proizvod Hilbertovih potprostora za svaki od N čvorova rešetke

$$\mathcal{H} = \prod_{i=1}^N \mathcal{H}_i.$$

⁵ U predstojećim jednačinama je uzeto $\hbar = 1$.

Odatle je dimenzionalnost ukupnog Hilbertovog prostora data sa

$$\dim \mathcal{H} = (2S + 1)^N,$$

što predstavlja komplikovaniji problem za matematičko rešavanje za veliko N , s obzirom da hamiltonian nije dijagonalan. Treba napomenuti da postoje različite metode za dijagonalizaciju linearog hamiltonijana; jedna od njih će biti opisana u *Poglavlju 5*, za šta je neophodno uvesti postupak bozonizacije.

Dakle, sledeći cilj jeste preslikati stanja (i odgovarajuće spinske operatore) iz Hilbertovog prostora u bozonske stepene slobode. Polazeći od Hilbertovog prostora za bozonske operatore $\hat{\alpha}_n^\dagger$ i $\hat{\alpha}_n$ sa komutacionim relacijama

$$[\hat{\alpha}_n, \hat{\alpha}_m^\dagger] = \delta_{n,m}, \quad [\hat{\alpha}_n, \hat{\alpha}_m] = 0, \quad (3.10)$$

potrebno je ograničiti se na Hilbertov prostor iste dimenzionalnosti kao u slučaju spinskih operatora, tj. biće korišćen bazis

$$\{|n_n\rangle\}_S = \{|0_n\rangle, \dots, |2S_n\rangle\}$$

sa svojstvenim vrednostima za operator broja pobuđenja

$$\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n |n_n\rangle = n_n |n_n\rangle, \quad n_n = 0, 1, 2, \dots, 2S.$$

Dakle, pri definisanju prelaza sa spinskim na bozonskim operatorem, treba voditi računa o tome da za broj bozonskih pobuđenja na datom čvoru rešetke važi uslov

$$\langle \hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n \rangle \leq 2S. \quad (3.11)$$

Naime, Boze-operatori mogu da kreiraju/anihiliraju proizvoljan broj pobuđenja od 0 do ∞ , ali stanja sa $\langle \hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n \rangle > 2S$ ne predstavljaju fizička stanja. Odavde se zaključuje da, iako je bozonski Hilbertov prostor zapravo beskonačan, operatori su izgrađeni tako da se nikad ne napušta fizički potprostor stanja. On sadrži $2S + 1$ stanja sa bozonskim okupacionim brojevima $0, 1, 2, \dots, 2S$, a uslov (3.11) važi dok god je temperatura niska (a odatle i broj pobuđenja po čvoru manji) i spin sistema dovoljno velik, pa je samim tim i postupak bozonizacije utoliko tačniji.

3.4.2 Opšta transformacija

Jednačina (3.9) važi u slučaju primene sledeće parametrizacije [27]

$$\hat{S}_{n_\alpha}^+ = \sqrt{2S} \left(1 - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{2S} \right)^{\frac{1+\nu}{2}} \hat{\alpha}_n, \quad \hat{S}_{n_\alpha}^- = \sqrt{2S} \hat{\alpha}_n^\dagger \left(1 - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{2S} \right)^{\frac{1+\nu}{2}}, \quad (3.12)$$

uz važenje relacije (3.8). Operatori $\hat{S}_n^\pm = S_n^x \pm i\hat{S}_n^y$ su već definisani (videti 3.4), $\nu \in \mathbb{R}$ je proizvoljna konstanta, a $\hat{\alpha}_n^\dagger$ i $\hat{\alpha}_n$ predstavljaju bozonske kreacione i anihilacione operatore koji zadovoljavaju komutacione relacije (3.10).

Holštajn-Primakova transformacija

Ako se u izrazu (3.12) odabere $\nu = 0$, dobija se široko prihvaćena i primenjivana spinska reprezentacija Holštajna i Primakova (*Holstein-Primakoff*) (HP) [20]. Za slučaj antiferomagneta, nakon rotiranja rešetke b , mogu se definisati HP bozoni kao za slučaj feromagneta (dakle, izrazi važe za obe podrešetke):

$$\hat{S}_{n_\alpha}^+ = \sqrt{2S} \sqrt{1 - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{2S}} \hat{\alpha}_n, \quad \hat{S}_{n_\alpha}^- = \sqrt{2S} \hat{\alpha}_n^\dagger \sqrt{1 - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{2S}}, \quad (3.13)$$

gde oznaka α стоји за a , односно b подреšetku. Iz gornje relacije lako se dobija (3.8). Relacije (3.8) i (3.13), zajedno sa (3.9) ispunjavaju uslov ermitivnosti:

$$(\hat{S}_{n_\alpha}^+)^* = \hat{S}_{n_\alpha}^- \quad (3.14)$$

i stoga transformišu početni hamiltonijan u njemu ermitski u Boze-reprezentaciji. Ako se prepostavi da je temperatura dovoljno niska, tada je odstupanje sistema od Nelovog stanja $|\psi\rangle^N$ srazmerno malo [25], pa je odatle i srednji broj pobuđenja na uočenom čvoru mali, i važi:

$$\frac{\langle \hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n \rangle}{S} = \frac{\langle \hat{n}_n \rangle}{S} \ll 1. \quad (3.15)$$

Tada je korenu funkciju u HP transformaciji moguće razviti u red:

$$\left(1 - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{2S}\right)^{\frac{1}{2}} \approx 1 - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{4S} - \frac{\hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n \hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n}{32S^2} - \dots \quad (3.16)$$

Ako u hamiltonijan (3.7) uvedemo bozonske operatore date relacijama (3.13), koristeći razvoj u red (3.16), aproksimativni hamiltonijan će imati sledeći oblik:

$$\hat{H} = -\frac{Nz}{2} JS^2 + \hat{H}_0 + \hat{H}_1. \quad (3.17)$$

U izrazu (3.17) prvi sabirak je klasična Nelova energija. Drugi sabirak je bilinearan po Boze-operatorima i daje energiju magnona prisutnih u sistemu. Deo hamiltonijana označen sa \hat{H}_1 sadrži članove višeg reda koji opisuju magnonsku interakciju. S obzirom da je izraz (3.17) dobijen pod pretpostavkom niskih temperatura, tj. malog broja pobuđenja, magnonska interakcija se u prvoj aproksimaciji može zanemariti. Naime, zanemareni članovi opisuju rasejanje spinskih talasa. Na niskim temperaturama je broj magnona mali pa se njihova međusobna interakcija može zanemariti.

Linearna teorija spinskih talasa tretira magnone kao nezavisne čestice, što na visokim temperaturama svakako nije slučaj. Dakle, u slučaju niskih temperatura se korena funkcija (3.16) u HP transformaciji aproksimira jedinicom, a ovaj postupak je poznat pod nazivom Blohova aproksimacija. Time se uvodi teorija linearnih spinskih talasa (*Linear Spin-Wave, LSW*), pa je prelaz sa spinskih na Boze-operatore dat sledećim izrazima:

$$\hat{S}_{n_\alpha}^+ \approx \sqrt{2S} \hat{\alpha}_n, \quad \hat{S}_{n_\alpha}^- \approx \sqrt{2S} \hat{\alpha}_n^\dagger. \quad (3.18)$$

Linearna teorija spinskih talasa biće primenjena za određivanje spektra magnonskih energija, kao i drugih fizičkih veličina kupratnog antiferomagneta La_2CuO_4 (videti *Poglavlje 5*) gde će biti pokazano da ova teorija daje zadovoljavajuće rezultate u oblasti niskih, ali i viših temperatura.

Dajson-Maljejeva transformacija

Kako izbor $\nu \neq 0$ narušava uslov ermitivnosti (3.14), transformacija rezultira u nemitskom efektivnom Boze-hamiltonijanu. Uprkos tome, slučaj $\nu = 1$, poznat kao Dajson-Maljejeva (*Dyson-Maleev*) transformacija (DM) [28] se često koristi jer iz nje proizilaze jednostavnije transformacije

$$\hat{S}_{n_\alpha}^z = S - \hat{\alpha}_n^\dagger \hat{\alpha}_n, \quad \hat{S}_{n_\alpha}^+ = \sqrt{2S} \hat{\alpha}_n, \quad \hat{S}_{n_\alpha}^- = \sqrt{2S} \left(\hat{\alpha}_n^+ - \frac{1}{2} \hat{\alpha}_n^+ \hat{\alpha}_n^+ \hat{\alpha}_n \right), \quad (3.19)$$

čime se hamiltonijan ograničava do članova sa proizvodom šest operatora, što znači da su spinski operatori predstavljeni pomoću konačnog reda po Boze-operatorima. Ova činjenica predstavlja prednost DM reprezentacije u odnosu na reprezentaciju Holštajn-Primakova (i slične postupke bozonizacije) gde je razvoj davao beskonačan red koji je trebalo preseći kako bi ova transformacija bila dalje primenljiva.

Razlog uvođenja nelinearne DM transformacije je činjenica da se na njoj zasniva samousaglašena teorija spinskih talasa (*Self-Consistent Spin-Wave, SCSW*) za dvodimenzionalni Hajzenbergov AFM. Ova teorija predstavlja korekciju teorije linearnih spinskih talasa, koja se ogleda u boljem slaganju teorijskih rezultata sa eksperimentalnim. To će biti pokazano u *Poglavlju 7*, poređenjem rezultata ova dva pristupa.

Važno je napomenuti da, bez obzira na nedostatak svake od navedenih transformacija, izbor jedne od njih ne utiče na fizičke veličine i rezultate koje slede (videti *Poglavlje 7*).

3.5 MERMIN-VAGNEROVA TEOREMA, SPINSKA ANIZOTROPIJA I GOLDSTONOVI BOZONI

Poznato je da termalne fluktuacije razuređuju dugodometno uređenje. Kada je reč o 3D sistemima, ukoliko je temperatura mnogo viša od uobičajene vrednosti energije sparivanja J , dugodometno uređenje više ne postoji, tj. magnetizacija postaje jednaka nuli, što odgovara faznom prelazu iz uređene u neuređenu fazu na nekoj kritičnoj temperaturi T_c . S druge strane, Mermin-Vagnerova teorema tvrdi da 2D izotropni magneti, kao npr. Hajzenbergov antiferomagnet, poseduju dugodometno uređenje samo na $T = 0\text{ K}$ [25], što znači da termalna pobuđenja razuređuju sistem već na infinitezimalno niskim temperaturama. Jedinjenje koje ćemo izučavati, La_2CuO_4 , ima konačnu vrednost kritične temperature koja iznosi $325 \pm 5\text{ K}$ [13, 14], što se može dobiti ili razmatranjem 3D modela, tj. uključivanjem slabe međuravanske interakcije, ili uračunavanjem spinske anizotropije u 2D modelu. U radu će biti pokazano da se ova jedinjenja ipak mogu opisati koristeći 2D Hajzenbergov model, koji na zadovoljavajući način reprodukuje eksperimentalno dobijene vrednosti fizičkih veličina od interesa (videti *Poglavlje 7*).

Mermin-Vagnerova teorema se odnosi na sve modele sa kontinualnom simetrijom, čija je simetrija viša od simetrije osnovnog stanja, što je, između ostalog, slučaj i za Hajzenbergov hamiltonijan [17]. Naime, Hajzenbergov hamiltonijan (3.7) je invarijantan u odnosu na trodimenzionalne rotacije spinskih operatora. S druge strane, klasično osnovno stanje antiferomagneta, tj. Nelovo stanje, je invarijantno u odnosu na rotaciju spinskih operatora u ravni oko z -ose. Odatle je lako zaključiti da Nelovo stanje ima nižu simetriju od Hajzenbergovog hamiltonijana, tj. dolazi do spontanog narušavanja simetrije. Prema Goldstonovoj teoremi se, kao posledica narušavanja simetrije, pri prelasku iz osnovnog u neko od pobuđenih stanja (na primer, zbog termalnih fluktuacija) kao pobuđenja sistema javljaju bezmaseni bozoni, tzv. Goldstonovi bozoni, čija energija teži nuli sa talasnim vektorom. Goldstonova teorema važi u odsustvu spinske anizotropije⁶. Za anizotropan hamiltonijan simetrija hamiltonijana postaje jednaka simetriji osnovnog stanja sistema, te uslovi pod kojima važi gore navedena teorema nisu više ispunjeni, što će biti pokazano u *Poglavlju 7*.

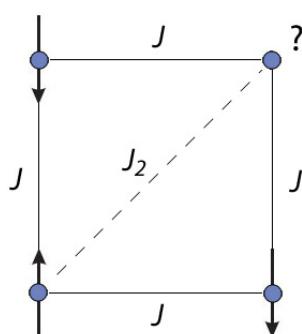
⁶ Prostorna anizotropija dopušta postojanje Goldstonovog moda.

4

EFEKTIVNI HAMILTONIJAN ZA La_2CuO_4

Prvi korak u analizi jeste zapisivanje efektivnog hamiltonijana za La_2CuO_4 , usled čega je važno identifikovati interakcije između spinova koji potiču od nepotpunjenih Cu^{2+} ljudski. Nedopirani kuprati u oblasti niskih temperatura mogu biti opisani 2D Hajzenbergovim modelom (3.2) sa spinom $S = \frac{1}{2}$. Prvi pokušaj reproducovanja eksperimentalnih rezultata za magnonski spektar zasnivao se na Hajzenbergovom hamiltonijanu sa uračunatom interakcijom samo između najbližih suseda. Takav model je dao spektar elementarnih ekscitacija, koji se sa zadovoljavajućom preciznošću slagao sa dobijenim u prvima eksperimentima, koji su izvedeni sa neutronima energije 2 – 50 meV [29]. Ipak, kasniji eksperimenti izvedeni korišćenjem epitermalnih neutrona energije 0,1 – 1,0 eV i detektora veće preciznosti za red veličine pokazali su da potpuniji opis disperzije u okolini granice Briluenove zone u slučaju jedinjenja La_2CuO_4 zahteva uzimanje u obzir interakcija koje nisu uključene u 2D hamiltonijan sa interakcijama prvih suseda.

4.1 FRUSTRIRANI MAGNETIZAM



Slika 12.: Frustrirani spinovi sa anti-feromagnetskim sparivanjem, $J, J_2 > 0$ i antiferomagnetskom interakcijom drugih i trećih suseda, J_2 i J_3 . Ako se u obzir uzme samo interakcija suseda u ravni, tada rešetka

Pojam frustriranog magnetizma se odnosi na sisteme u kojima je prisutno više različitih vrsta interakcija, tj. J između prvih najbližih suseda, J_2 između drugih najbližih suseda, J_3 između trećih najbližih suseda itd, pri čemu se ove interakcije međusobno nadmeću (*Slika 12*). Tipičan primer ove vrste frustracije se dešava na kvadratnoj rešetki sa antiferomagnetskom interakcijom prvih suseda J i antiferomagnetskom interakcijom drugih i trećih

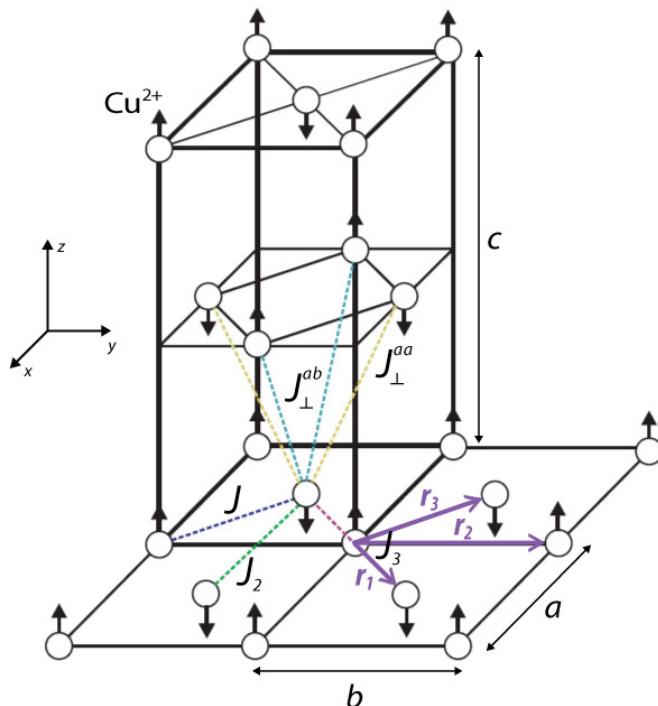
suseda, J_2 i J_3 . Ako se u obzir uzme samo interakcija suseda u ravni, tada rešetka

nije frustrirana. Ali, kada se doda interakcija drugih najbližih suseda, spinovi se ne mogu orijentisati suprotno u odnosu na sve prve najbliže susede i sve druge najbliže susede, pa je takav sistem frustriran.

U slučaju prisustva frustracije, osnovno stanje sistema spinova uvek predstavlja kompromis između nadmećućih interakcija. Obično je kod antiferomagnetičnih sistema jedna od interakcija dominantna u odnosu na ostale. Polazeći od geometrije sistema i veličine interakcija među spinovima, dolazi se do kvalitativnog razumevanja kako određeni skup interakcija proizvodi određeno stanje.

4.2 EFEKTIVNI HAMILTONIJAN FRUSTRIRANOG SISTEMA

Osnovni cilj je dijagonalizovati hamiltonijan koji se zasniva na Hajzenbergovom modelu (3.2), a u svrhu dobijanja disperzije spinskih talasa. S tim u vezi, neophodno je utvrditi koje interakcije daju osnovni doprinos, čime se dolazi do izraza za efektivni hamiltonijan.



Slika 13.: Magnetna elementarna čelija La_2CuO_4 . Prikazani su samo Cu^{2+} joni. Smer strelice označava usmerenost spina na datom čvoru kristalne rešetke. Isprekidanim linijama su prikazane dominantne interakcije izmene u ravni i između susednih CuO_2 ravni. Parametri elementarne čelije označeni su sa a , b i c . Sa slike se vidi da se kristalografska i magnetna jedinična čelija poklapaju i da se karakterišu zapreminom abc . Vektori r_1 , r_2 i r_3 povezuje spinove koji učestvuju u cikličnoj interakciji (videti *Odeljak 4.3*), a koji su definisani na sledeći način: $r_1 = \frac{a}{2}\mathbf{e}_x + \frac{b}{2}\mathbf{e}_y$, $r_2 = b\mathbf{e}_y$ i $r_3 = -\frac{a}{2}\mathbf{e}_x + \frac{b}{2}\mathbf{e}_y$.

Napišimo hamiltonijan koji pored interakcije prvih suseda sadrži i članove koji se odnose na interakcije sa drugim i trećim susedima u ravni, opisane integralima izmene J_2 i J_3 , respektivno, i interakciju između CuO₂ ravni koja je opisana integralom izmene J_{\perp}^{ab} , odnosno J_{\perp}^{ab} , što je predstavljeno na *Slici 13*.

Vodeći računa o tipu sparivanja među spinovima i koristeći izraze (3.5) i (3.7) dobija se sledeći oblik hamiltonijana:

$$\begin{aligned}\hat{H}' = & J \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{+(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{-(b)} \right) - (1 + \eta) \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^{z(b)} \right] + \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{-(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{+(a)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_2}^{z(a)} \right] + \\ & + \frac{J_2}{2} \sum_{\mathbf{n}_b, \delta_2} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_2}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_2}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_2}^{z(b)} \right] + \\ & + \frac{J_3}{2} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_3} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_3}^{-(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_3}^{+(a)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_3}^{z(a)} \right] + \\ & + \frac{J_3}{2} \sum_{\mathbf{n}_b, \delta_3} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_3}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_3}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_3}^{z(b)} \right] + \\ & + J_{\perp}^{ab} \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_{\perp}^{ab}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}}^{+(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}}^{-(b)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}}^{z(b)} \right] + \\ & + \frac{J_{\perp}^{aa}}{2} \sum_{\mathbf{n}_b, \delta_{\perp}^{aa}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{aa}}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{aa}}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{aa}}^{z(b)} \right] + \\ & + \frac{J_{\perp}^{bb}}{2} \sum_{\mathbf{n}_b, \delta_{\perp}^{bb}} \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{bb}}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{bb}}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{bb}}^{z(b)} \right] + \\ & - g\mu_B \mathcal{H} \left[\sum_{\mathbf{n}_a} \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} - \sum_{\mathbf{n}_b} \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \right].\end{aligned}$$

Prvi član u ovom izrazu opisuje interakciju izmene među susednim spinova u ravni, gde se \mathbf{n}_a i \mathbf{n}_b odnose na položaje datog spina u podrešetki a ili b , dok se δ_1 odnosi na vektor koji povezuje dati spin sa njegovim najbližim susedom u ravni. Parametar η ($\eta > 0$) označava spinsku anizotropiju i definiše laku osu magnetizacije duž pozitivnog smera z -ose. Prepostavljena priroda interakcije najbližih suseda je antiferomagnetna. Drugi, treći, četvrti i peti član opisuju interakciju između drugih i trećih suseda u ravni, respektivno, gde δ_2 i δ_3 označavaju vektore koje povezuju uočeni spin sa njemu najbližim drugim, odnosno trećim susedima u ravni. Interakcija drugih i trećih suseda je takođe antiferomagnetna, što rezultuje pojavom frustracije u sistemu, koja vodi do feromagnetskog uređenja drugih, odnosno trećih suseda. Nadalje će se podrazumevati da je $J_2 = J_3$, tj. da su integrali interakcije

izmene drugog i trećeg suseda jednaki [6, 30], što se smatra opravdanim, uzimajući u obzir da su obe interakcije ostvarene putem dve Cu–O–Cu veze. Faktor $\frac{1}{2}$ se pojavljuje zato što se svaki par spinova uračunava dva puta. Šesti, sedmi i osmi član opisuju interakciju datog spina sa najbližim spinovima u susednim ravnima. Priroda ove interakcije je antiferomagnetna i utiče na pojavu frustracije. Slično prethodnom članu, lako je uočiti (*Slika 13*) između kojih spinova se ostvaruje antiferomagnetno, odnosno feromagnetno sparivanje, pri čemu se uzima da je $J_{\perp}^{aa} = J_{\perp}^{bb}$. Vektori δ_{\perp}^{aa} (odnosno δ_{\perp}^{bb}) i δ_{\perp}^{ab} predstavljaju vektore koji povezuju odgovarajuće članove u susednim ravnima između kojih je ostvarena interakcija J_{\perp}^{aa} , odnosno J_{\perp}^{ab} , respektivno. Uobičajeno je izostavljanje ove interakcije kako je za ovaj tip jedinjenja interplanarna interakcija mnogo slabija nego intraplanarna ($J \ll J_{\perp}$) pošto je interakcija između susednih ravn ostvarena putem dva nemagnetna LaO sloja. Takođe treba napomenuti da izraz (5.17) predstavlja opštiji oblik ($3D$) hamiltonijana zbog mogućnosti proširenja analize i na konačne temperature. Međutim, u ovom radu ćemo se oslanjati isključivo na $2D$ model i analizu rezultata u okviru istog (videti *Poglavlje 7*). Poslednji član hamiltonijana opisuje interakciju sa spoljašnjim magnetnim poljem jačine \mathcal{H} usmeren duž z -ose. U ovom članu, g je Landeov faktor elektrona, a μ_B – Borov magneton.

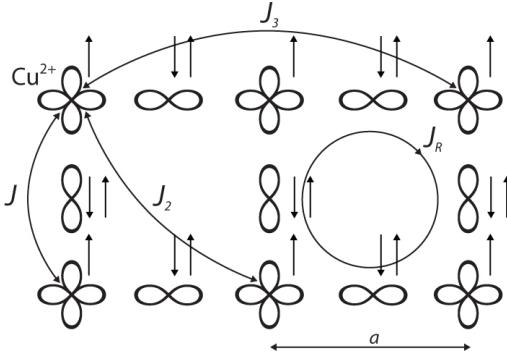
4.3 CIKLIČNA INTERAKCIJA

Značaj ciklične interakcije predviđen je teorijski [30, 31] i potvrđen eksperimentalno brojnim eksperimentalnim rezultatima iz disperzije spinskih talasa na granici Briluenove zone [6]. Ova interakcija potiče od člana višeg reda razvoja po $\frac{t}{U}$ koji figuriše u jednozonskom polupopunjrenom Habardovom modelu (3.1), i ima oblik:

$$\hat{H}_R = J_R \sum_{\langle n, m, k, l \rangle} \left[(\hat{\mathbf{S}}_n \cdot \hat{\mathbf{S}}_m) (\hat{\mathbf{S}}_k \cdot \hat{\mathbf{S}}_l) + (\hat{\mathbf{S}}_n \cdot \hat{\mathbf{S}}_l) (\hat{\mathbf{S}}_k \cdot \hat{\mathbf{S}}_m) - (\hat{\mathbf{S}}_n \cdot \hat{\mathbf{S}}_k) (\hat{\mathbf{S}}_m \cdot \hat{\mathbf{S}}_l) \right], \quad (4.1)$$

gde $\langle n, m, k, l \rangle$ označava četiri vektora položaja čvorova koji učestvuju u četvorospinskoj cikličnoj interakciji. Dakle, ciklična izmena nastaje usled jake hibridizacije unutar Cu_4O_4 veze (*Slika 14*) u CuO_2 ravni.

Primećeno je da su za četvorospinsku cikličnu interakciju kvantne fluktuacije jače nego u slučaju uobičajenog Hajzenbergovog modela. Podaci dobijenim neelastičnim neutronskim rasejanjem daju vrednosti za učešće ciklične interakcije u iznosu od oko 27 – 29% u odnosu na interakcije izmene najbližih suseda [31].



Slika 14: CuO₂ ravan sa prikazanim Cu 3d_{x²-y²} i O 2p_{x,y} orbitalama koje učestvuju u magnetnim interakcijama. Veličine J, J₂ i J₃ su integrali izmene između prvih, drugih i trećih suseda, a J_R predstavlja cikličnu interakciju koja sparuje spinove unutar Cu₄O₄ veze. Strelice označavaju spinove valentnih elektrona koji učestvuju u interakcijama.

Hamiltonian (4.1) se može raspisati za obe podrešetke, a i b (vodeći računa da je jedna od podrešetki zarođena), pri čemu se položaj spinova koji učestvuju u interakciji određuje vektorima \mathbf{r}_1 , \mathbf{r}_2 i \mathbf{r}_3 (Slika 13), koji se odnose, respektivno, na čvorove m, k i l. Prelaskom na operatore \hat{S}^+ i \hat{S}^- dobija se sledeći zapis:

$$\begin{aligned} \hat{H}_R = & J_R \sum_{\mathbf{n}_a} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{+(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{-(b)} \right) - (1 + \eta) \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{z(b)} \right] \cdot \right. \\ & \cdot \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{+(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{-(b)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{z(b)} \right] + \\ & + \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{+(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{-(b)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{z(b)} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{+(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{-(b)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{z(b)} \right] - \\ & - \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{-(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_a}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_2}^{z(a)} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_1}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_a+\mathbf{r}_3}^{z(b)} \right] + \\ & + J_R \sum_{\mathbf{n}_b} \left\{ \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{+(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{-(a)} \right) - (1 + \eta) \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{z(a)} \right] \cdot \right. \\ & \cdot \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{+(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{-(a)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{z(a)} \right] + \\ & + \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{+(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{-(a)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{z(a)} \right] \cdot \\ & \cdot \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{+(a)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{-(a)} \right) - \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{z(a)} \right] - \\ & - \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{+(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{-(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{+(a)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_b}^{z(b)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_2}^{z(b)} \right] \cdot \\ & \cdot \left. \left[\frac{1}{2} \left(\hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{+(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{-(b)} + \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{-(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{+(b)} \right) + \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_1}^{z(a)} \hat{S}_{\mathbf{n}_b+\mathbf{r}_3}^{z(a)} \right] \right\}. \end{aligned} \quad (4.2)$$

Konačan efektivni hamiltonijan dobija se sabiranjem relacija (4.1) i (4.2) i glasi:

$$\boxed{\hat{H}_{eff} = \hat{H}' + \hat{H}_R}. \quad (4.3)$$

5

ANALIZA U OKVIRU TEORIJE LINEARNIH SPINSKIH TALASA

U cilju opisa magnetnih ekscitacija u La_2CuO_4 polazi se od sledećih pretpostavki:

- magnetne interakcije se mogu opisati pomoću Hajzenbergovog modela na kvadratnoj rešetki,
- osnovno stanje ima Nelovo uređenje,
- do izraza za magnonsku disperziju se može koristeći klasičnu (veliko S) teoriju spinskih talasa, u okviru linearne teorije spinskih talasa (LSW), odnosno samousaglašene teorije spinskih talasa (SCSW)

Do aproksimativnog rešenja 2D Hajzenbergovog modela može se doći bozonizacijom spinova koristeći različite bozonske formalizme (videti *Odeljak 3.4.1-2*). Tako dobijen hamiltonijan treba dijagonalizovati, nakon čega je moguće odrediti različite fizičke veličine karakteristične za sistem (energija elementarnih ekscitacija, magnetizacija, specifična toploplota), što će biti pokazano u ovom poglavlju u okviru LSW teorije, odnosno u *Poglavlju 6* u SCSW pristupu.

5.1 EFEKTIVNI HAMILTONIJAN U LSW TEORIJI

Zarad određivanja LSW spektra elementarnih ekscitacija u La_2CuO_4 polazi se od hamiltonijana datog izrazom (4.3). Kako su spinski talasi, tj. magnoni, bozonske eksitacije, spinske operatore ćemo zameniti Boze-operatorima. Prednosti ovih operatora navedene su u *Odeljku 3.4.1*. Koristeći relaciju (3.18) (videti *Odeljak 3.4.2*) za Holštajn-Primakovu reprezentaciju, u Blohovoj aproksimaciji dobija se sledeći hamiltonijan, bilinearan po Boze-operatorima (članovi višeg reda, koji opisuju magnonske interakcije, se zanemaruju):

$$\begin{aligned}
 \hat{H}_{LSW} \approx & - (1 + \eta) JS^2 z \frac{N}{2} + (J_{\perp}^{aa} - J_{\perp}^{ab}) S^2 z \frac{N}{2} + J_2 S^2 Nz + \\
 & + JS \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\hat{a}_{\mathbf{n}_a} \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_1} + \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^\dagger \right] + (1 + \eta) JS \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_1} \left[\hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a} + \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_1}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_1} \right] - \\
 & - 2J_2 Sz \sum_{\mathbf{n}_a} \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a} - 2J_2 Sz \sum_{\mathbf{n}_b} \hat{b}_{\mathbf{n}_b}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_b} + J_2 S \sum_{\substack{\mathbf{n}_a, \delta_i \\ i=2,3}} \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a + \delta_i} + J_2 S \sum_{\substack{\mathbf{n}_b, \delta_i \\ i=2,3}} \hat{b}_{\mathbf{n}_b}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_b + \delta_i} + \\
 & + J_{\perp}^{ab} S \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_{\perp}^{ab}} \left[\hat{a}_{\mathbf{n}_a} \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}} + \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}}^\dagger \right] + J_{\perp}^{ab} S \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_{\perp}^{ab}} \left[\hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a} + \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{ab}} \right] - \\
 & - J_{\perp}^{aa} Sz \sum_{\mathbf{n}_a} \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a} - J_{\perp}^{aa} Sz \sum_{\mathbf{n}_b} \hat{b}_{\mathbf{n}_b}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_b} + J_{\perp}^{aa} S \sum_{\mathbf{n}_a, \delta_{\perp}^{aa}} \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a + \delta_{\perp}^{aa}} + J_{\perp}^{aa} S \sum_{\mathbf{n}_b, \delta_{\perp}^{aa}} \hat{b}_{\mathbf{n}_b}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_b + \delta_{\perp}^{aa}} + \\
 & + g\mu_B \mathcal{H} \left[\sum_{\mathbf{n}_a} \hat{a}_{\mathbf{n}_a}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{n}_a} - \sum_{\mathbf{n}_b} \hat{b}_{\mathbf{n}_b}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{n}_b} \right] + \\
 & + \sum_{\alpha=a,b} \left\{ \left[(1 + \eta)^2 S^4 - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha} \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger - \right. \right. \\
 & - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha} - \\
 & - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2} \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3} - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3}^\dagger - \\
 & - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3} - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2} \Big] + \\
 & + \left[(1 + \eta)^2 S^4 - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha} \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3} - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3}^\dagger - \right. \\
 & - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha} - \\
 & - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2} \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} - (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger - \\
 & - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2} \Big] - \\
 & - \left[(1 + \eta)^2 S^4 + (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha} + (1 + \eta) S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2} - \right. \\
 & - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_2} - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha}^\dagger \hat{\alpha}_{\mathbf{n}_\alpha} + \\
 & + (1 + \eta) S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} + (1 + \eta) S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3} - \\
 & \left. \left. - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_3} - (1 + \eta)^2 S^3 \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1}^\dagger \hat{\beta}_{\mathbf{n}_\alpha + \mathbf{r}_1} \right] \right\}, \tag{5.1}
 \end{aligned}$$

gde je α , odnosno β jednako a , tj. b , pri $\alpha \neq \beta$, a sumiranje se vrši po obe podrešetke. U cilju dobijanja disperzije relacije zgodno je hamiltonijan (5.1) izraziti u impulsnom prostoru. Stoga se uvode Furije-transformacije operatora $\hat{\alpha}_n^{(\dagger)}$:

$$\hat{\alpha}_n = \frac{1}{\sqrt{N_\alpha}} \sum_k \hat{\alpha}_k e^{ik \cdot n}, \quad \hat{\alpha}_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N_\alpha}} \sum_k \hat{\alpha}_k^\dagger e^{-ik \cdot n}. \tag{5.2}$$

Prilikom izvođenja hamiltonijana koristi se činjenica da je $N_a = N_b$, kao i $\sum_{\mathbf{n}_\alpha} = \frac{N_\alpha}{2}$, s obzirom da se radi o dve podrešetke. Takođe važi

$$\sum_{\delta_1} = \sum_{\delta_2} = \sum_{\delta_3} = \sum_{\delta_{\perp}^{ab}} = \sum_{\delta_{\perp}^{aa}} = z = 4,$$

što odgovara broju najbližih suseda u slučaju jedinjenja La_2CuO_4 .

Koristeći definiciju Kronekerovog simbola

$$\frac{1}{N_a} \sum_{\mathbf{n}_a} e^{i(\mathbf{k} \pm \mathbf{q}) \cdot \mathbf{n}_a} = \delta_{\mathbf{k} \mp \mathbf{q}, 0} \quad (5.3)$$

dolazi se do sledećeg izraza za hamiltonijan:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{LSW} = & - (1 + \eta) JS^2 z \frac{N}{2} + (J_{\perp}^{aa} - J_{\perp}^{ab}) S^2 z \frac{N}{2} + J_2 S^2 Nz + (1 + \eta)^2 J_R N S^4 + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{LSW}(\mathbf{k}) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}) + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{I}_{LSW}(\mathbf{k}) (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger + \hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}}) + \\ & + h \sum_{\mathbf{k}} (\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} - \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}}), \end{aligned} \quad (5.4)$$

gde su veličine $\mathcal{E}_{LSW}(\mathbf{k})$, $\mathcal{I}_{LSW}(\mathbf{k})$ i h date izrazima

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{LSW}(\mathbf{k}) = & JSz \left[(1 + \eta) - 2\lambda_2 + \lambda_2 (\gamma_2(\mathbf{k}) + \gamma_3(\mathbf{k})) + \lambda_{\perp}^{ab} - \lambda_{\perp}^{aa} (1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})) - \right. \\ & \left. - (1 + \eta) \frac{\lambda_R}{4} (\gamma_2(\mathbf{k}) + (1 + \eta)) \right], \end{aligned} \quad (5.5)$$

$$\mathcal{I}_{LSW}(\mathbf{k}) = JSz \left[\gamma_1(\mathbf{k}) + \lambda_{\perp}^{ab} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) - (1 + \eta) \frac{\lambda_R}{4} \gamma_1(\mathbf{k}) \right], \quad (5.6)$$

$$h = g\mu_B \mathcal{H}. \quad (5.7)$$

Veličine označene sa λ predstavljaju redukovane integrale izmene ($\lambda_2 = J_2/J$, odnosno $\lambda_{\perp}^{ab/aa} = J_{\perp}^{ab/aa}/J$), dok su veličine $\gamma(\mathbf{k})$ geometrijski faktori definisani sa:

$$\gamma_1(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\delta_1} e^{i\delta_1 \cdot \mathbf{k}} = \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_y b}{2}, \quad (5.8)$$

$$\gamma_2(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\delta_2} e^{i\delta_2 \cdot \mathbf{k}} = \frac{1}{2} (\cos k_x a + \cos k_y b), \quad (5.9)$$

$$\gamma_3(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\delta_3} e^{i\delta_3 \cdot \mathbf{k}} = \cos k_x a \cos k_y b, \quad (5.10)$$

$$\gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\delta_{\perp}^{ab}} e^{i\delta_{\perp}^{ab} \cdot \mathbf{k}} = \cos \frac{k_x a}{2} \cos \frac{k_z c}{2}, \quad (5.11)$$

$$\gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) = \frac{1}{z} \sum_{\delta_{\perp}^{aa}} e^{i\delta_{\perp}^{aa} \cdot \mathbf{k}} = \cos \frac{k_y b}{2} \cos \frac{k_z c}{2}. \quad (5.12)$$

Kako hamiltonijan (5.4) sadrži operatorske proizvode $\hat{a}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger$ i $\hat{a}_k \hat{b}_{-k}$ koji ne održavaju broj magnona, potrebno je dijagonalizovati ga. Za to se koristi „u-v“ transformacijom Bogoljubova (*Nikolay Nikolayevich Bogolyubov*) [25], koja se sastoji u uvođenju novih Boze-operatora \hat{A}_k i \hat{B}_k relacijama:

$$\begin{aligned}\hat{a}_k &= u_k \hat{A}_k + v_k \hat{B}_{-k}^\dagger, & \hat{b}_k &= v_k \hat{A}_{-k}^\dagger + u_k \hat{B}_k, \\ \hat{a}_k^\dagger &= u_k \hat{A}_k^\dagger + v_k \hat{B}_{-k}, & \hat{b}_k^\dagger &= v_k \hat{A}_{-k} + u_k \hat{B}_k^\dagger,\end{aligned}$$

gde su u_k i v_k parne i realne funkcije koje zadovoljavaju uslov

$$u_k^2 - v_k^2 = 1. \quad (5.13)$$

kako bi transformacija bila kanonska.

Nakon „u-v“ transformacije dolazi se do hamiltonijana

$$\begin{aligned}\hat{H}_{LSW} = & - (1 + \eta) JS^2 z \frac{N}{2} + (J_\perp^{aa} - J_\perp^{ab}) S^2 z \frac{N}{2} + J_2 S^2 Nz + \\ & + \sum_k ([\mathcal{E}_{LSW}(k) + h] v_k^2 + [\mathcal{E}_{LSW}(k) - h] v_k^2) + \sum_k 2 \mathcal{I}_{LSW}(k) u_k v_k + \\ & + \sum_k \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k ([\mathcal{E}_{LSW}(k) + h] u_k^2 + [\mathcal{E}_{LSW}(k) - h] v_k^2 + 2 u_k v_k \mathcal{I}_{LSW}(k)) + \quad (5.14) \\ & + \sum_k \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k ([\mathcal{E}_{LSW}(k) - h] u_k^2 + [\mathcal{E}_{LSW}(k) + h] v_k^2 + 2 u_k v_k \mathcal{I}_{LSW}(k)) + \\ & + \sum_k (2 \mathcal{E}_{LSW}(k) u_k v_k + \mathcal{I}_{LSW}(k) [u_k^2 + v_k^2]) (\hat{A}_k^\dagger \hat{B}_{-k}^\dagger + \hat{A}_k \hat{B}_{-k}).\end{aligned}$$

Funkcije u_k i v_k se mogu odrediti iz jednačine (5.13) i uslova da nedijagonalni član u hamiltonijanu (5.14) bude jednak nuli:

$$2 \mathcal{E}_{LSW}(k) u_k v_k + \mathcal{I}_{LSW}(k) [u_k^2 + v_k^2] = 0. \quad (5.15)$$

Rešenje tog sistema jednačina glasi:

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{E}_{LSW}(k)}{\sqrt{\mathcal{E}_{LSW}^2(k) - \mathcal{I}_{LSW}^2(k)}} + 1 \right]}, \quad v_k = - \sqrt{\frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{E}_{LSW}(k)}{\sqrt{\mathcal{E}_{LSW}^2(k) - \mathcal{I}_{LSW}^2(k)}} - 1 \right]}. \quad (5.16)$$

Ako uvedemo funkcije (5.16) u (5.14), dobijamo dijagonalni hamiltonijan

$$\hat{H}_{LSW} = E_0^{LSW} + \sum_k \left[E_{LSW}^A(k) \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + E_{LSW}^B(k) \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k \right], \quad (5.17)$$

Veličina E_0^{LSW} predstavlja energiju osnovnog stanja koja je, kako smo rekli, niža od energije Nelovog stanja, te stabilizuje osnovno stanje. Ova veličina je data izrazom

$$\begin{aligned}E_0^{LSW} = & - (1 + \eta) JS^2 z \frac{N}{2} + (J_\perp^{aa} - J_\perp^{ab}) S^2 z \frac{N}{2} + J_2 S^2 Nz + (1 + \eta)^2 J_R N S^4 + \\ & + \sum_k \left(\sqrt{\mathcal{E}_{LSW}^2(k) - \mathcal{I}_{LSW}^2(k)} - \mathcal{E}_{LSW}(k) \right),\end{aligned} \quad (5.18)$$

dok su $E_{LSW}^{A/B}(\mathbf{k})$ energije magnona u prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja

$$E_{LSW}^{A/B}(\mathbf{k}) = \sqrt{\mathcal{E}_{LSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{LSW}^2(\mathbf{k})} \pm h. \quad (5.19)$$

Može se primetiti da u prisustvu spoljašnjeg magnetnog polja postoje dve magnonske grane. U slučaju $h = 0$ postoji jedna grana, dvostruko degenerisana, koju ćemo označavati $E_{LSW}(\mathbf{k})$. Na ovom mestu treba ukazati na činjenicu da u LSW pristupu energija magnona ne zavisi od temperature.

Treba napomenuti da izraz (5.17) predstavlja opšiji oblik (3D) hamiltonijana zbog mogućnosti proširenja analize i na konačne temperature. Međutim, u ovom radu ćemo se oslanjati isključivo na 2D model i analizu rezultata u okviru istog (videti *Poglavlje 7*).

5.2 MAGNETIZACIJA PODREŠETKE U LSW TEORIJI

Magnetizacija podrešetke (bilo a ili b) je na proizvoljnoj temperaturi u odsustvu magnetnog polja data izrazom ¹:

$$\langle \hat{S}^{z(a)} \rangle = S - \langle \hat{a}_n^\dagger \hat{a}_n \rangle = S - \frac{1}{N_a} \sum_k \langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle. \quad (5.20)$$

Srednja vrednost $\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle$ računa se pomoću (5.13):

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = u_k^2 \langle \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k \rangle + v_k^2 \langle \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k \rangle = \frac{u_k^2}{e^{\beta E_{LSW}(k)} - 1} + \frac{v_k^2}{1 - e^{-\beta E_{LSW}(-k)}}, \quad (5.21)$$

gde je $\beta = 1/\theta = 1/k_B T$. Kada u (5.20) ubacimo (5.21) i izraze za u_k i v_k dobijamo:

$$\langle \hat{S}_{LSW}^{z(a)} \rangle = S - \frac{1}{N_a} \sum_k \left[\frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_{LSW}(k)}{E_{LSW}(k)} \coth \frac{E_{LSW}(k)}{2\theta} - \frac{1}{2} \right]. \quad (5.22)$$

Na apsolutnoj nuli, prethodni izraz postaje:

$$\langle \hat{S}_{LSW}^{z(a)} \rangle_0 = S - \frac{1}{N_a} \sum_k \left[\frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_{LSW}(k)}{E_{LSW}(k)} - \frac{1}{2} \right] = S - \delta \langle \hat{S}_{LSW}^{z(a)} \rangle_0, \quad (5.23)$$

gde $\delta \langle \hat{S}_{LSW}^{z(a)} \rangle_0$ označava kvantne fluktuacije na $T = 0$ K.

5.3 GOLDSTONOV MOD U LSW TEORIJI

Razmotrimo sada magnonsku energiju u blizini centra Briluenove zone, gde važi $\mathbf{k} \approx 0$. Tada se izrazi (5.8), (5.9) i (5.10) mogu razviti po talasnom vektoru koristeći

¹ Ovaj izraz važi i za slučaj $h \neq 0$, ali će u daljoj analizi magnetno polje biti izostavljeno, pa smo zato odabrali $h = 0$.

aproksimaciju $\cos x \approx 1 - \frac{x^2}{2}$ i zadržavajući članove kvadratne po komponentama talasnog vektora:

$$\gamma_1(\mathbf{k} \approx 0) \approx 1 - \frac{(k_x a)^2}{8} - \frac{(k_y b)^2}{8}, \quad (5.24)$$

$$\gamma_2(\mathbf{k} \approx 0) \approx 1 - \frac{(k_x a)^2}{4} - \frac{(k_y b)^2}{4}, \quad (5.25)$$

$$\gamma_3(\mathbf{k} \approx 0) \approx 1 - \frac{(k_x a)^2}{2} - \frac{(k_y b)^2}{2}. \quad (5.26)$$

Zamenom (5.24)-(5.26) u jednačinu (5.19) i ponovo zadržavajući samo članove kvadratne po komponentama talasnog vektora, dolazi se do izraza za 2D magnonsku energiju u blizini centra BZ:

$$E_{LSW}^{(2D)}(\mathbf{k} \approx 0) \approx JSz \sqrt{\frac{1}{4} - \frac{3}{2}\lambda_2 + \frac{3}{4}\lambda_2\lambda_R + \frac{3}{16}\lambda_R^2 k}. \quad (5.27)$$

Iz (5.27) se vidi da kad $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ za $\eta = 0$ energija magnona iščezava, pa se odatle može zaključiti da postoji Goldstonov mod ².

5.4 MAGNONSKI DOPRINOS SPECIFIČNOJ TOPLOTI U LSW TEORIJI

Magnonski doprinos specifičnoj topotri u La_2CuO_4 računat je u literaturi uglavnom u okviru LSW teorije, kao npr. u referencama [32, 33], u kojima autori koriste pojednostavljeni model sa kvadratnom rešetkom i uračunavaju samo interakciju izmene najbližih suseda u ravni. Stoga je moguće naći popravke ovih rezultata u okviru našeg složenijeg 2D modela u kojem su prisustne frustracija i ciklična interakcija. U tom cilju, usrednjićemo izraz (5.17) po Gibsovom ansamblu i time dobiti unutrašnju energiju La_2CuO_4 na temperaturi T u odsustvu spoljašnjeg magnetnog polja:

$$U_{LSW} = E_0^{LSW} + \sum_{\mathbf{k}} E_{LSW}(\mathbf{k}) (\langle \hat{A}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{A}_{\mathbf{k}} \rangle + \langle \hat{B}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{\mathbf{k}} \rangle) = E_0^{LSW} + 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{LSW}(\mathbf{k})}{e^{\frac{E_{LSW}(\mathbf{k})}{\theta}} - 1}. \quad (5.28)$$

Specifična topota, u ovom slučaju za magnon, definiše se kao izvod unutrašnje energije po temperaturi:

$$C_V^{LSW}(T) = \frac{dU_{LSW}}{dT} = 2 \sum_{\mathbf{k}} \frac{E_{LSW}^2(\mathbf{k})}{\left[e^{\frac{E_{LSW}(\mathbf{k})}{\theta}} - 1 \right]^2} e^{\frac{E_{LSW}(\mathbf{k})}{\theta}} \frac{k_B}{\theta^2}. \quad (5.29)$$

Na osnovu ovog izraza biće izračunat magnonski doprinos specifičnoj topotri u okviru LSW teorije.

² Slično se izvodi i za SCSW slučaj, što neće biti posebno razmatrano, kako nije od dalje važnosti za analizu. U okviru *Poglavlja 7* će se postojanje Goldstonovog moda samo potvrditi.

6

ANALIZA U OKVIRU SAMOUSAGLAŠENE TEORIJE SPINSKIH TALASA

6.1 EFEKTIVNI HAMILTONIJAN U SCSW TEORIJI

Primenjujući transformaciju Dajson-Maljejeva (videti odeljak *Odeljak 3.4.2*), dobijaju se članovi četvrtog i šestog reda. Kako hamiltonijan u okviru samousaglašene teorije ima složen oblik, sam izraz će biti izostavljen. Članovi četvrtog reda koji se pojavljuju u ovom hamiltonijanu su članovi od interesa, te ćemo ih dalje dekuplovati, dok članove šestog reda zanemarujemo. Navedimo jedan primer dekuplovanja [34]:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} \hat{a}_{n_a+\delta_2} &= \left\langle \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \right\rangle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} + \left\langle \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \right\rangle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} + \\ &+ \left\langle \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2} \right\rangle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} + \left\langle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} \right\rangle \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger + \quad (6.1) \\ &+ \left\langle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \right\rangle \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2} + \left\langle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} \right\rangle \hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger . \end{aligned}$$

Članovi koji „preživljavaju“ za slučaj čvorova jedne iste podrešetke (u izrazu (6.1) je to a -podrešetka) su tipa $\langle \hat{\alpha}^\dagger \hat{\alpha} \rangle$ ($\hat{\alpha} = \hat{a}, \hat{b}$), pa se dobija:

$$\hat{a}_{n_a} \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} \hat{a}_{n_a+\delta_2} = 2 \left\langle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} \right\rangle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} + 2 \left\langle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a+\delta_2} \right\rangle \hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a}, \quad (6.2)$$

pri čemu je uzeta u obzir činjenica da članovi oblika $\hat{a}_{n_a+\delta_2}^\dagger \hat{a}_{n_a}$ komutiraju. Ovaj postupak je najbolje sprovesti u direktnom prostoru, jer će pri prelasku u impulsni prostor doći do izmene u indeksima. Navedimo primer i za dekuplovanje operatora iz različitih podrešetki:

$$\begin{aligned} \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} \hat{b}_{n_a+\delta_1} &= \left\langle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \right\rangle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} + \left\langle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \right\rangle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} + \\ &+ \left\langle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} \right\rangle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} + \left\langle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} \right\rangle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger + \quad (6.3) \\ &+ \left\langle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} \right\rangle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} + \left\langle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} \right\rangle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger . \end{aligned}$$

U ovom slučaju će pored članova iz iste podrešetke ($\langle \hat{\alpha}^\dagger \hat{\alpha} \rangle$ ($\hat{\alpha} = \hat{a}, \hat{b}$)) „preživeti“ i srednje vrednosti tipa $\langle \hat{a}^\dagger \hat{b}^\dagger \rangle$ (kao i tipa $\langle \hat{a} \hat{b} \rangle$ u odgovarajućim članovima). Koristimo činjenicu da operatori sa različitim podrešetki komutiraju, kako bismo što više pojednostavimo izraze, te (6.3) postaje:

$$\hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} = 2 \langle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \rangle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1} + 2 \langle \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger \rangle \hat{a}_{n_a}^\dagger \hat{b}_{n_a+\delta_1}^\dagger. \quad (6.4)$$

Prilikom prelaska u impulsni prostor vodi se računa o svim pojedinostima koje su bile navedene u *Poglavlju 5*, dakle, koristimo relacije (5.2) i (5.3). Za dvooperatorske članove je izvođenje analogno kao za LSW slučaj, dok je Furije-transformacija članova koji sadrže korelacione funkcije znatno složenija.

Treba napomenuti da će se u različitim članovima javiti različite korelacione funkcije, ali da važi $\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = \langle \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \rangle$, kao i $\langle \hat{a}_q^\dagger \hat{b}_{-q}^\dagger \rangle = \langle \hat{a}_q \hat{b}_{-q} \rangle$ [34]. Pored toga, dobijeni hamiltonijan će biti neermitski, kako je korišćena DM transformacija (videti *Odeljak 3.4.2*). To se koriguje uvođenjem člana koji simetrizuje ovaj hamiltonijan. Tada, u odsustvu anizotropije i spoljašnjeg polja, konačan hamiltonijan u okviru SCSW teorije ima sledeći oblik:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SCSW} = & -JS^2z\frac{N}{2} + \left(J_{\perp}^{aa} - J_{\perp}^{ab}\right)S^2z\frac{N}{2} + J_2S^2Nz + J_RNS^4 + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}} \hat{b}_{-\mathbf{k}} + \hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{-\mathbf{k}}^\dagger \right) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) \left(\hat{a}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{a}_{\mathbf{k}} + \hat{b}_{\mathbf{k}}^\dagger \hat{b}_{\mathbf{k}} \right), \end{aligned} \quad (6.5)$$

gde su veličine $\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})$ i $\mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})$ date izrazima

$$\begin{aligned} \mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) = & JSz \left\{ 1 - 2A(T) - 2D(T) - \lambda_2 [2 - \gamma_2(\mathbf{k}) - \gamma_3(\mathbf{k}) + \right. \\ & - 2A(T)(2 - \gamma_2(\mathbf{k}) - \gamma_3(\mathbf{k})) + 2L(T)(1 - \gamma_2(\mathbf{k})) + \\ & + 2M(T)(1 - \gamma_3(\mathbf{k}))] + \lambda_{\perp}^{ab} [1 - 2A(T) - 2P(T)] - \\ & - \lambda_{\perp}^{aa} [1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) - 2A(T)(1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})) + 2Q(T)(1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}))] - \\ & - \lambda_R \left[\frac{1}{4}(1 + \gamma_2(\mathbf{k})) - \frac{3}{2}A(T)(1 + \gamma_2(\mathbf{k})) - 3D(T) - \right. \\ & \left. \left. - 2D(T)\gamma_2(\mathbf{k}) - \frac{1}{2}G(T)(3 + \gamma_2(\mathbf{k})) \right] \right\}, \end{aligned} \quad (6.6)$$

odnosno

$$\begin{aligned} \mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k}) = & JSz \left[\gamma_1(\mathbf{k}) (1 - 2A(T) - 2D(T)) + \right. \\ & + \lambda_{\perp}^{ab} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) (1 - 2A(T) - 2P(T)) + \\ & \left. + \lambda_R \gamma_1(\mathbf{k}) \left(3A(T) + 2G(T) + 5D(T) - \frac{1}{2} \right) \right]. \end{aligned} \quad (6.7)$$

Oznake $A(T), D(T), G(T), L(T), M(T), P(T)$ i $Q(T)$ predstavljaju veličine izražene preko korelacionih funkcija:

$$\begin{aligned} A(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \\ D(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \gamma_1(\mathbf{k}) \\ G(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \cos(k_{\alpha} \alpha \mathbf{k}), \quad (\alpha = a, b) \\ L(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \gamma_2(\mathbf{k}) \\ M(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \gamma_3(\mathbf{k}) \\ P(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{b}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} \rangle \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) \\ Q(T) &= \frac{2}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle \hat{a}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{a}_{\mathbf{k}} \rangle \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (6.8)$$

Za veličinu $G(T)$ koja odgovara cikličnoj interakciji ispostavlja se da je jednaka korelacionoj funkciji $L(T)$.

U daljem postupku želimo da dijagonalizujemo hamiltonijan, te ponovo prime njujemo „u-v“ transformaciju analogno izvođenju iz *Odeljka 5.1*. Dakle, uvođenjem novih Boze-operatora, dobija se hamiltonijan sledećeg oblika:

$$\begin{aligned} \hat{H}_{SCSW} = & -JS^2 z \frac{N}{2} + (J_{\perp}^{aa} - J_{\perp}^{ab}) S^2 z \frac{N}{2} + J_2 S^2 Nz + J_R N S^4 + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}^2 + \mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}^2) + \sum_{\mathbf{k}} 2\mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \hat{A}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{A}_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}^2 + \mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}^2 + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} \hat{B}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{\mathbf{k}} (\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}}^2 + \mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) v_{\mathbf{k}}^2 + 2u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} \mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})) + \\ & + \sum_{\mathbf{k}} (2\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) u_{\mathbf{k}} v_{\mathbf{k}} + \mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k}) [u_{\mathbf{k}}^2 + v_{\mathbf{k}}^2]) (\hat{A}_{\mathbf{k}}^{\dagger} \hat{B}_{-\mathbf{k}}^{\dagger} + \hat{A}_{\mathbf{k}} \hat{B}_{-\mathbf{k}}). \end{aligned} \quad (6.9)$$

Funkcije u_k i v_k , analogno izrazu (5.16), su u SCSW slučaju date sa

$$u_k = \sqrt{\frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}} + 1 \right]}, \quad v_k = -\sqrt{\frac{1}{2} \left[\frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}} - 1 \right]}, \quad (6.10)$$

te se nakon uvođenja istih u (6.9) dobija dijagonalan hamiltonijan:

$$\hat{H}_{SCSW} = E_0^{SCSW} + \sum_{\mathbf{k}} E_{SCSW}(\mathbf{k}) [\hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k]. \quad (6.11)$$

U hamiltonijanu (6.11) E_0^{SCSW} predstavlja energiju osnovnog stanja koja je, u slučaju SCSW pristupa, definisana sa

$$E_0^{SCSW} = -(1 + \eta) JS^2 z \frac{N}{2} + (J_\perp^{aa} - J_\perp^{ab}) S^2 z \frac{N}{2} + J_2 S^2 Nz + J_R N S^4 + \sum_{\mathbf{k}} \left(\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})} - \mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k}) \right), \quad (6.12)$$

dok izraz $E_{SCSW}(\mathbf{k})$ predstavlja energiju antiferomagnetskih magnona u odsustvu magnetnog polja

$$E_{SCSW}(\mathbf{k}) = \sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}. \quad (6.13)$$

U LSW pristupu energija magnona ne zavisi od temperature. S druge strane, SCSW teorija daje temperatursku zavisnost u okviru veličina (6.8). S tim u vezi, moguće je ispitati ponašanje magnonskog spektra na većim temperaturama, što će biti učinjeno u *Poglavlju 7.*

Sledeći korak je izraziti korelacione funkcije preko operatora \hat{A}_k i \hat{B}_k :

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = u_k^2 \langle \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k \rangle + v_k^2 \langle \hat{B}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_{-\mathbf{k}} \rangle = \frac{u_k^2}{e^{\beta E_{SCSW}(\mathbf{k})} - 1} + \frac{v_k^2}{1 - e^{-\beta E_{SCSW}(-\mathbf{k})}}, \quad (6.14)$$

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger \rangle = u_k v_k \langle \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_{-\mathbf{k}} \rangle + u_k v_k \langle \hat{B}_{-\mathbf{k}}^\dagger \hat{B}_k \rangle = \frac{u_k v_k}{e^{\beta E_{SCSW}(\mathbf{k})} - 1} + \frac{u_k v_k}{1 - e^{-\beta E_{SCSW}(-\mathbf{k})}}. \quad (6.15)$$

Pozivajući se na izraze (6.10), i znajući da je

$$u_k v_k = -\frac{1}{2} \frac{\mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})}{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}} \quad (6.16)$$

korelacione funkcije (6.14) i (6.15) poprimaju sledeći oblik

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k \rangle = \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}} \coth \frac{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}}{2\theta} - 1 \right\}, \quad (6.17)$$

$$\langle \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_k^\dagger \rangle = -\frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})}{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}} \coth \frac{\sqrt{\mathcal{E}_{SCSW}^2(\mathbf{k}) - \mathcal{I}_{SCSW}^2(\mathbf{k})}}{2\theta} \right\}. \quad (6.18)$$

Uvrštanjem izraza (6.17) i (6.18) u (6.8) konačno se dobija:

$$\begin{aligned} A(T) &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} \coth \frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{2\theta} - 1 \right\} \\ D(T) &= -\frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} \coth \frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{2\theta} \right\} \gamma_1(\mathbf{k}) \\ L(T) &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} \coth \frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{2\theta} - 1 \right\} \gamma_2(\mathbf{k}) \\ M(T) &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} \coth \frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{2\theta} - 1 \right\} \gamma_3(\mathbf{k}) \\ P(T) &= -\frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{I}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} \coth \frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{2\theta} - 1 \right\} \gamma_\perp^{ab}(\mathbf{k}) \\ Q(T) &= \frac{2}{N} \sum_k \frac{1}{2} \left\{ \frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} \coth \frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{2\theta} - 1 \right\} \gamma_\perp^{aa}(\mathbf{k}). \end{aligned} \quad (6.19)$$

Veličine (6.19) će biti objašnjenje u okviru *Poglavlja 7*, gde će biti dato objašnjenje za njihovo računanje.

6.2 MAGNETIZACIJA PODREŠETKE U SCSW TEORIJI

Razmatranje je analogno LSW slučaju, s tim što se sada u izraz (5.22) uvštavaju vrednosti za energiju u SCSW pristupu, te izraz za magnetizaciju podrešetke na absolutnoj nuli poprima sledeći oblik:

$$\langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0 = S - \frac{1}{N_a} \sum_k \left[\frac{1}{2} \frac{\mathcal{E}_{SCSW}(\mathbf{k})}{E_{SCSW}(\mathbf{k})} - \frac{1}{2} \right] = S - \delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0, \quad (6.20)$$

gde su \mathcal{E}_{SCSW} i E_{SCSW} definisani u prethodnom odeljku, a $\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$ predstavlja kvantne fluktuacije na $T = 0$ K u okviru SCSW pristupa.

6.3 MAGNONSKI DOPRINOS SPECIFIČNOJ TOPLOTI U SCSW TEORIJI

Izraz za specifičnu toplotu ima isti oblik kao i u okviru LSW teorije

$$C_V^{SCSW}(T) = \frac{dU_{SCSW}}{dT} = 2 \sum_k \frac{E_{SCSW}^2(\mathbf{k})}{\left[e^{\frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{\theta}} - 1 \right]^2} e^{\frac{E_{SCSW}(\mathbf{k})}{\theta}} \frac{k_B}{\theta^2}. \quad (6.21)$$

s tim što u gornjoj relaciji figurišu veličine dobijene u okviru SCSW pristupa.

7

ANALIZA REZULTATA

7.1 MAGNONSKI SPEKTAR

Kako je intraplanarna interakcija kod jedinjenja La_2CuO_4 dominantna, opravdano je razmatrati $2D$ model u odsustvu spoljašnjeg magnentog polja ($h = 0$) i ispitati da li se u okviru tog modela može korektno reprodukovati eksperimentalno dobijeni magnonski spektar [6,7]. Stoga se u okviru LSW teorije u izrazima (5.5) i (5.6) uzima $\lambda_{\perp}^{ab} = \lambda_{\perp}^{aa} = 0$, pa se (5.19) svodi na izraz za magnonsku energiju u kojem figurišu parametri J , η , λ_2 i λ_R :

$$E_{LSW}^{(2D)}(\mathbf{k}) = JSz \sqrt{\left[(1 + \eta) - 2\lambda_2 + \lambda_2(\gamma_2(\mathbf{k}) + \gamma_3(\mathbf{k})) - \frac{\lambda_R}{4}(1 + \gamma_2(\mathbf{k})) \right]^2 - \left[\gamma_1(\mathbf{k}) - \frac{\lambda_R}{2}\gamma_1(\mathbf{k}) \right]^2}. \quad (7.1)$$

Ove parametre je moguće odrediti znajući eksperimentalne podatke za spektar elementarnih ekscitacija u La_2CuO_4 . Konkretno, pozivaćemo se na magnonski spektar dobijen neelastičnim rasejanjem neutrona na $T = 10\text{ K}$ u Coldea *et al.* [6]. Uzimajući dve eksperimentalno dobijene vrednosti za magnonske energije, moguće je, na osnovu (7.1), naći različite skupove parametara od interesa.

Eksperimentalne vrednosti za magnonsku energiju u tačkama $(\pi, 0)$ i $(\pi, -\pi)$, koje predstavljaju tačke na granicama prve Briluenove zone (BZ), iznose:

$$\begin{aligned} E_1 &= E(\pi, 0) = 292 \pm 7 \text{ meV}, \\ E_2 &= E(\pi, -\pi) = 314 \pm 7 \text{ meV}. \end{aligned} \quad (7.2)$$

Koristeći izraz (7.1) i uvrštavajući navedene vrednosti energije (7.2) u isti, pri tome vodeći računa da su geometrijski faktori u tačkama $(\pi, 0)$ i $(\pi, -\pi)$

$$\begin{aligned} \gamma_1(\mathbf{k})|_{(\pi,0)} &= 0, & \gamma_2(\mathbf{k})|_{(\pi,0)} &= 0, & \gamma_3(\mathbf{k})|_{(\pi,0)} &= -1, \\ \gamma_1(\mathbf{k})|_{(\pi,-\pi)} &= 0, & \gamma_2(\mathbf{k})|_{(\pi,-\pi)} &= -1, & \gamma_3(\mathbf{k})|_{(\pi,-\pi)} &= 1, \end{aligned} \quad (7.3)$$

dobijaju se dve jednačine iz kojih je moguće odrediti dve nepoznate, dakle, dva parametra. Tako se, za izotropni model $\eta = 0$, dobijaju sledeći skupovi parametara predstavljeni *Tabelom 1*¹:

Tabela 1.: Različiti modeli u zavisnosti od različitih vrednosti parametara u LSW pristupu

model \ parametri	J [meV]	$\lambda_2 = \lambda_3$	λ_R
J, J_2, J_3	179	0,0614525	0
J, J_R	157	0	0,280255
J, J_2, J_3, J_R	165,263	0,025	0,16624

gde je za model J, J_2, J_3, J_R uzeta vrednost $\lambda_2 = \lambda_3 = 0,025$ [30], odakle su dalje numerički dobijene vrednosti za J i λ_R . Uticaj parametra λ_2 na vrednosti J i λ_R dat je u *Tabeli 2*:

Tabela 2.: Izračunati parametri dobijeni za različite vrednosti λ_2 u LSW pristupu

$\lambda_2 = \lambda_3$	0,01	0,015	0,02	0,025
J	160,204	161,856	163,542	165,263
λ_R	0,23465	0,21185	0,18904	0,16624

gde se vidi da se vrednost J slabo menja sa promenom λ_2 . S druge strane, za različite vrednosti anizotropije, pri zadatoj vrednosti $\lambda_2 = \lambda_3 = 0,025$, dobija se novi skup parametara:

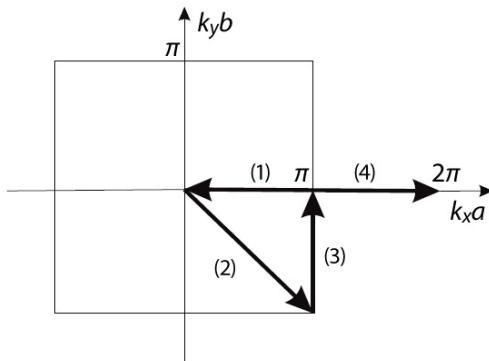
Tabela 3.: Izračunati parametri dobijeni za različite vrednosti η u LSW pristupu za $\lambda_2 = \lambda_3 = 0,025$

η	0	10^{-4}	10^{-3}	10^{-2}
J	165,263	165,246	165,097	163,614
λ_R	0,16624	0,16625	0,166344	0,17254

Vidi se da se sa promenom η vrednosti J i λ_R slabo menjaju, pa je stoga opravdano razmatrati $2D$ model.

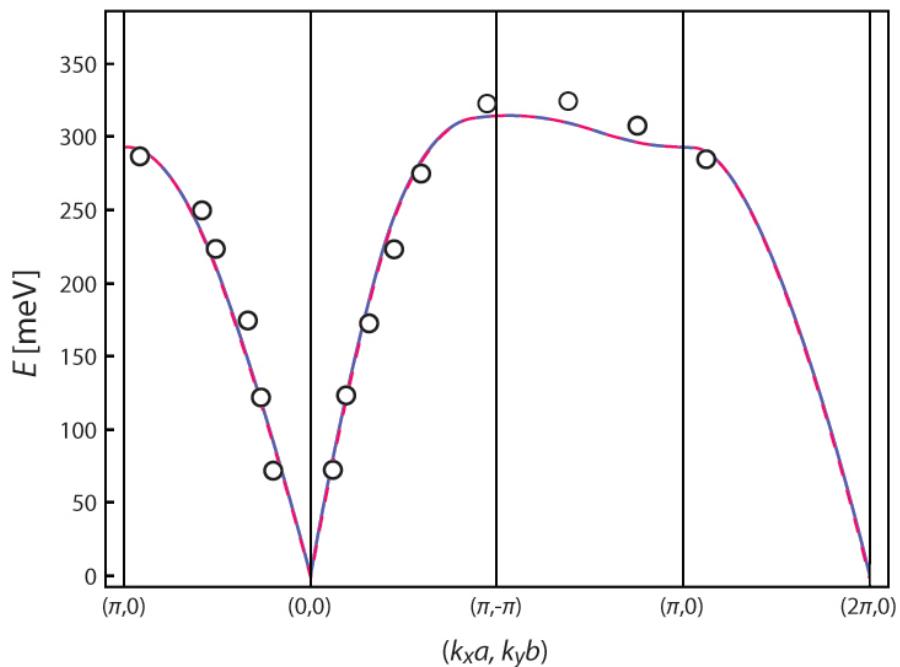
U cilju poređenja teorijskih rezultata sa eksperimentom, čime se utvrđuje ispravnost korišćenog modela, potrebno je dobiti disperziju duž onih pravaca u $2D$ AFM Briluenovoj zoni duž kojih su u [6] merene magnonske energije, što je prikazano na *Slici 15*. Tim postupkom se, koristeći izraz (7.1) za model J, J_2, J_3, J_R iz *Tabele 1* dobija spektar kao na *Slici 16*.

¹ Vrednosti J izražene u jedinicama meV - ubaci u tabelu.



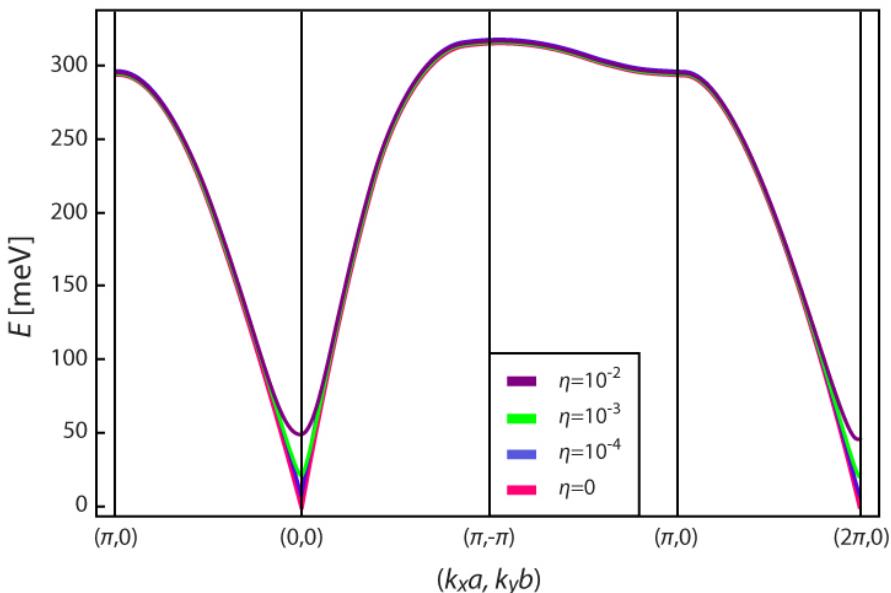
Slika 15: 2D AFM Briluenova zona za ortorombnu strukturu La_2CuO_4 zajedno sa „putanjom“ duž koje je meren/računat spektar magnonskih energija

Sa Slike 16 se vidi da je slaganje eksperimentalnih rezultata i disperzije koju daje naš model relativno dobro, ukazujući na opravdanost aproksimacije 3D ortorombne strukture 2D modelom na niskim temperaturama. Naime, disperziona kriva pokazuje da se karakteristike disperzije na granici Briluenove zone, navedene u [6], mogu reprodukovati upravo uračunavanjem i drugih interakcija pored interakcija najблиžih suseda. Takođe, isti grafik za disperziju se dobija u slučaju ostalih modela navedenih u Tabeli 1, odnosno Tabeli 2, što je i očekivano s obzirom da su u različitim modelima dobijeni različiti parametri koji zadovoljavaju istu funkcionalnu zavisnost (7.1).



Slika 16.: Spektar magnonskih energija u ortorombnoj fazi La_2CuO_4 duž pravaca visoke simetrije u 2D AFM BZ. Kružići predstavljaju eksperimentalne podatke dobijene neelastičnim rasejanjem neutrona na $T = 10 \text{ K}$ [6]. Isprekidana linija označena plavom bojom predstavlja teorijsku krivu izračunatu pomoću izraza (7.1) za skupove LSW parametara (J , λ_R i λ_2 , u odsustvu anizotropije $\eta = 0$) iz Tabele 1, dok puna linija crvene boje predstavlja teorijsku krivu izračunatu pomoću izraza (7.4) za skupove SCSW parametara (J , λ_R i λ_2) iz Tabele 4 (biće opisano kasnije u okviru ovog odeljka).

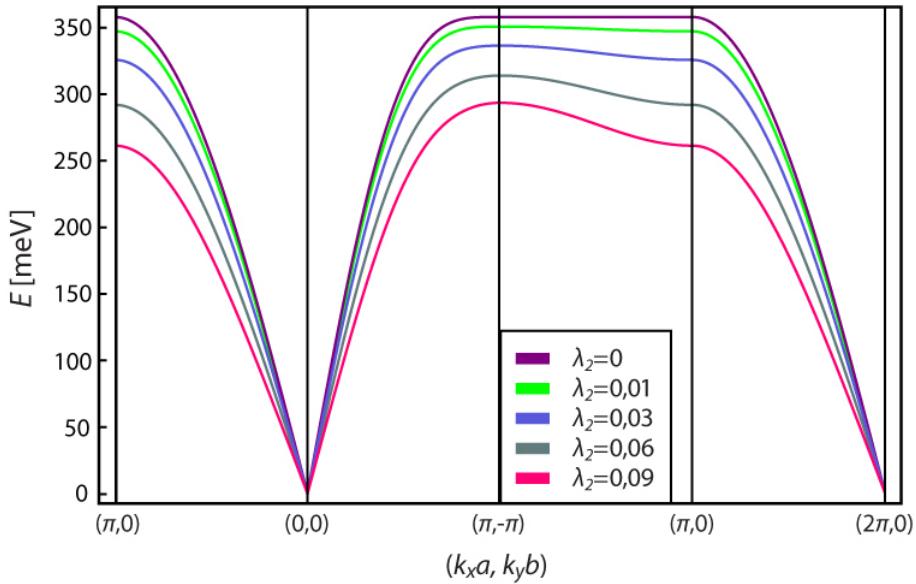
Na *Slici 17* data je disperzija za vrednosti parametara iz *Tabele 3*. Kako je navedeno u *Odeljku 3.5*, u slučaju anizotropnog modela, dakle pri $\eta \neq 0$, simetrija hamiltonijana postaje jednaka simetriji osnovnog stanja sistema, čime Goldstonova teorema prestaje da važi. To dovodi do pojavljivanja gepa u centru Briluenove zone $(0,0)$. Sa *Slike 17* se zaključuje da ovaj gep raste sa porastom vrednosti spinske anizotropije. S druge strane, vidi se da za $\eta = 0$, pri $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$ u $(0,0)$ energija magnona $E \rightarrow 0$, što ukazuje na postojanje Goldstonovog moda (plava kriva na *Slici 17*).



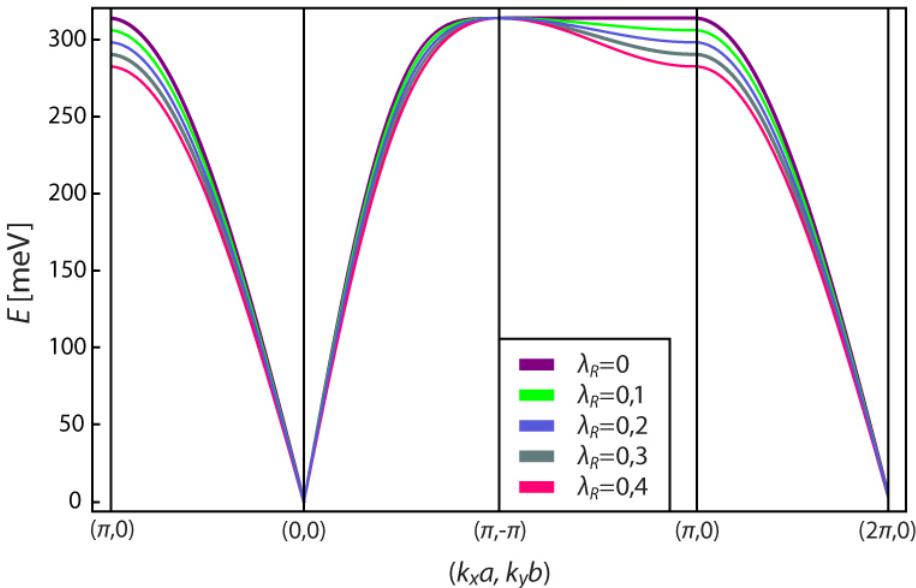
Slika 17.: Uticaj anizotropije u okviru LSW teorije za skupove parametara iz *Tabele 3*

Moguće je ispitati uticaj pojedinačnih interakcija na magnonski spektar, slično kako je urađeno u referenci [35] u okviru teorije perturbacija. Polazeći od modela J, J_2, J_3 (*Tabela 1*), gde je $\lambda_R = 0$, menjajući vrednosti λ_2 , dobijaju se magnonski spektri prikazani na *Slici 18*. Slično se dobija spektar prikazan na *Slici 19* za slučaj modela J, J_R (*Tabela 1*), menjajući vrednosti λ_R , pri čemu je $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$.

Naime, *Slike 18*, odnosno *19* sugeriju da se magnonski spektar jedinjenja La_2CuO_4 , koji se sa zadovoljavajućom tačnošću slaže sa eksperimentalnim predviđanjima, dobija upravo uzimanjem u obzir i drugih interakcija, pored interakcije prvih suseda. Sa *Slike 18* se vidi da se u odsustvu frustracije dobija plato u magnonskom spektru. Isti zaključak sledi na osnovu *Slike 19* – plato se dobija pri $\lambda_R = 0$. Dakle, spektar dobijen na osnovu eksperimentalnih rezultata [6] moguće je, u okviru ovog pristupa, reprodukovati samo u slučaju $\lambda_2 = \lambda_3 \neq 0$, odnosno $\lambda_R \neq 0$. Međutim, uočava se da uticaj ovih interakcija nije istovetan: *Slika 18* na kojoj je prikazan uticaj frustracije u J, J_2, J_3 modelu pokazuje da se čitav spektar „spušta“ sa povećanjem frustracije, dok je



Slika 18.: Uticaj frustracije u okviru LSW teorije za J, J_2, J_3 model iz *Tabele 1*. Ljubičasta kriva predstavlja disperzionu relaciju pri $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$.

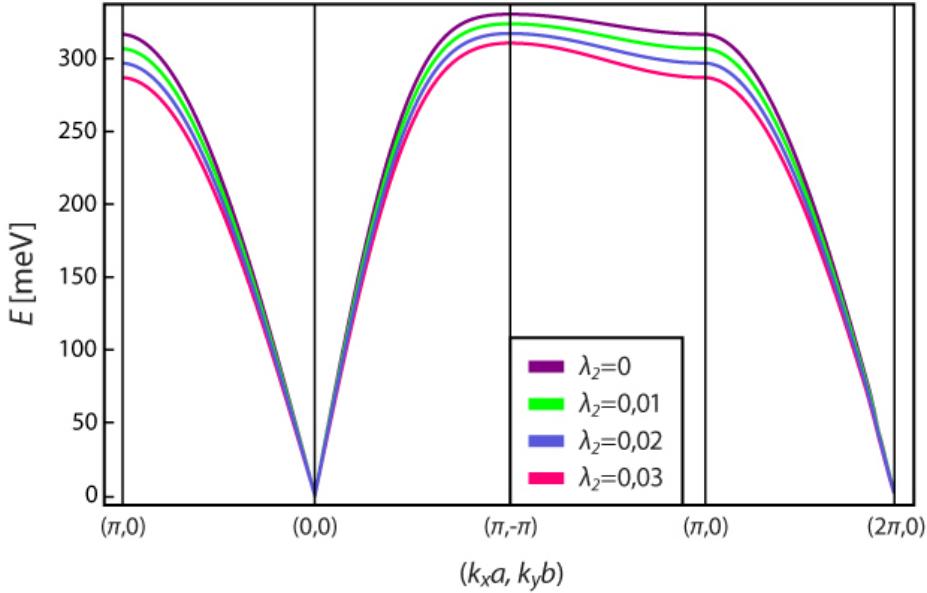


Slika 19.: Uticaj ciklične interakcije u okviru LSW teorije za J, J_R model iz *Tabele 1*. Ljubičasta kriva predstavlja disperzionu relaciju pri $\lambda_R = 0$.

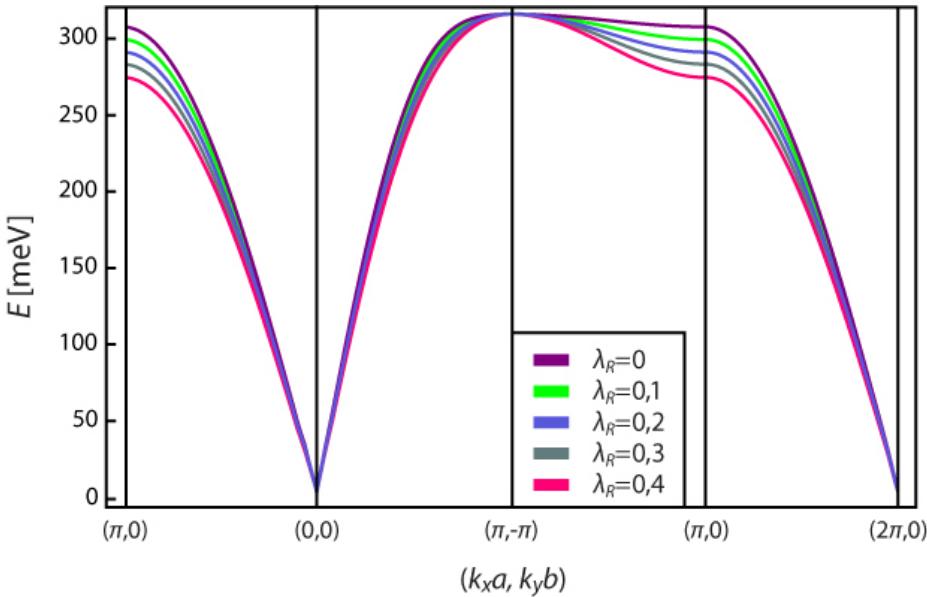
na *Slici 19* prikazan uticaj ciklične interakcije u J, J_R modelu, takav da „spušta“ deo spektra u tački $(\pi, 0)$, dok disperzija u $(\pi, -\pi)$ ostaje nepromenjena.

Razmotrimo sada najsloženiji model J, J_2, J_3, J_R (videti *Tabela 1*). Ovaj model pruža mogućnost ispitivanja uticaja kako frustracije, tako i ciklične interakcije na magnonski spektar. *Slika 20* prikazuje ponašanje spektra sa promenom frustracije, gde se može zapaziti da se jednako „spušta“ spektar kako u tački $(\pi, 0)$, tako i u

ANALIZA REZULTATA



Slika 20.: Uticaj frustracije u okviru LSW teorije za J, J_2, J_3, J_R model iz *Tabele 1*



Slika 21.: Uticaj ciklične interakcije u okviru LSW teorije za J, J_2, J_3, J_R model iz *Tabele 1*

tački $(\pi, -\pi)$. Takođe se vidi da disperzija zadržava karakterističan oblik čak i za vrednost $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$. To je usled činjenice da, za razliku od modela J, J_2, J_3 , model J, J_2, J_3, J_R sadrži još i cikličnu interakciju, koja dolazi do izražaja pri $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$, te ne dolazi do pojave platoa u spektru. Slično važi u suprotnom slučaju, kada variramo parametar λ_R : u slučaju kada je $\lambda_R = 0$ neće doći do pojave platoa usled prisustva frustracije, što nije bio slučaj u J, J_R modelu. Međutim, sličnost sa modelom J, J_R uočava se u činjenici da, u slučaju $\lambda_R \neq 0$, spektar ostaje nepromenjen u tački $(\pi, -\pi)$, dok se u $(\pi, 0)$ „spušta“ na uobičajen način.

Analogno LSW pristupu, i u SCSW se magnonski spektar dobija polazeći od izraza (6.13) za energiju magnona

$$\begin{aligned}
 E_{SCSW}^{(2D)}(\mathbf{k}) = & JSz \left(\left[1 - 2A(T) - 2D(T) - \lambda_2 [2 - \gamma_2(\mathbf{k}) - \gamma_3(\mathbf{k}) \right. \right. \\
 & - 2A(T) (2 - \gamma_2(\mathbf{k}) - \gamma_3(\mathbf{k})) + 2L(T) (1 - \gamma_2(\mathbf{k})) + \\
 & + 2M(T) (1 - \gamma_3(\mathbf{k})) \left. \right] + \lambda_{\perp}^{ab} [1 - 2A(T) - 2P(T)] - \\
 & - \lambda_{\perp}^{aa} [1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}) - 2A(T) (1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k})) + 2Q(T) (1 - \gamma_{\perp}^{aa}(\mathbf{k}))] - \\
 & - \lambda_R \left(\frac{1}{4} (1 + \gamma_2(\mathbf{k})) - \frac{3}{2} A(T) (1 + \gamma_2(\mathbf{k})) - 3D(T) - \right. \\
 & \left. \left. - 2D(T) \gamma_2(\mathbf{k}) - \frac{1}{2} G(T) (3 + \gamma_2(\mathbf{k})) \right)^2 \right. \\
 & - \left[\gamma_1(\mathbf{k}) (1 - 2A(T) - 2D(T)) + \lambda_{\perp}^{ab} \gamma_{\perp}^{ab}(\mathbf{k}) (1 - 2A(T) - 2P(T)) + \right. \\
 & \left. \left. + \lambda_R \gamma_1(\mathbf{k}) \left(3A(T) + 2G(T) + 5D(T) - \frac{1}{2} \right) \right]^2 \right]^{\frac{1}{2}} \right) , \tag{7.4}
 \end{aligned}$$

pri čemu se uzimaju poznate vrednosti za energiju i geometrijske faktore izraženi u (7.2) i (7.3), respektivno. Međutim, kako u SCSW pristupu figurišu veličine (6.19), uvrštavanjem istih u izraz (7.4) dobija se samousaglašena jednačina. Ovakav tip jednačina rešava se iterativnim postupkom. Naime, polazeći od poznatih LSW vrednosti za dati model, i ubacivanjem istih u jednačine u okviru SCSW pristupa, dobijaju se nove vrednosti uvrštenih parametara, a zatim se ovaj postupak ponavlja sve dok se vrednosti dve uzastopne iteracije ne poklope sa zadovoljavajućom tačnošću. Ovim postupkom se za različite modele dobijaju sledeći skupovi parametara:

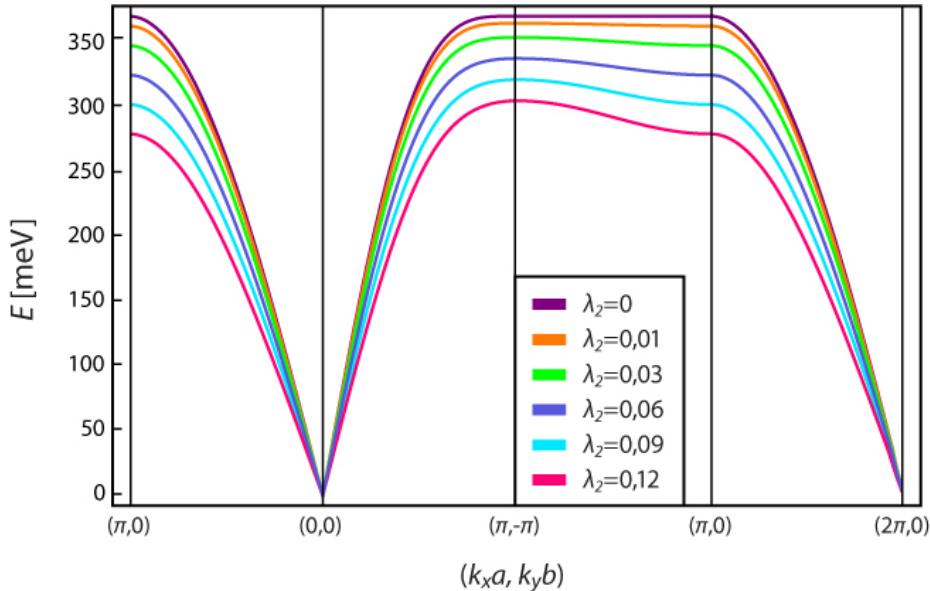
Tabela 4.: Različiti modeli u zavisnosti od različitih vrednosti parametara u SCSW pristupu

model \ parametri	J [meV]	$\lambda_2 = \lambda_3$	λ_R
J, J_2, J_3	160, 538	0, 103159	0
J, J_R	138, 367	0	0, 185117
J, J_2, J_3, J_R	143, 271	0, 025	0, 132467

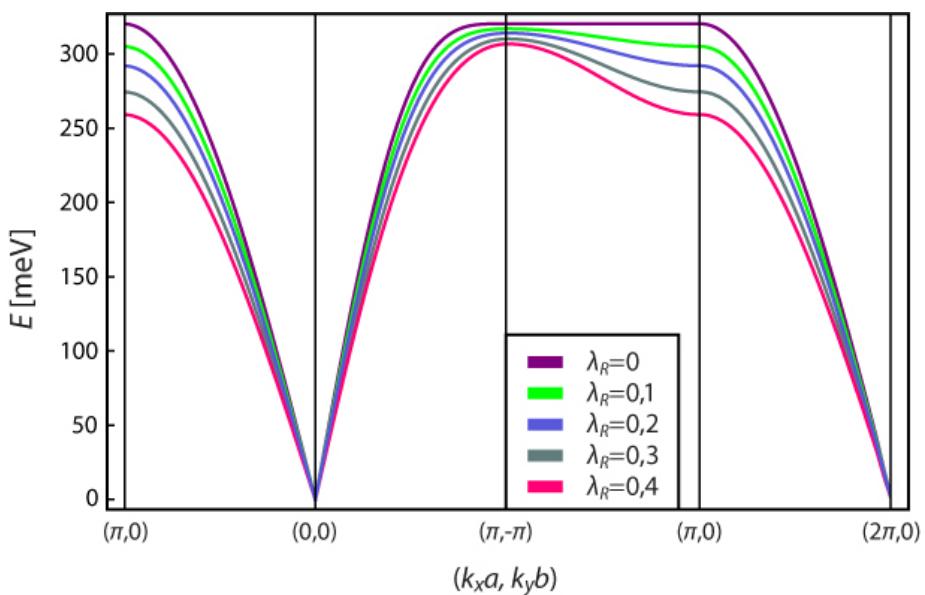
Magnonski spektri u okviru LSW, odnosno SCSW teorije se poklapaju (*Slika 16*). To je očekivano s obzirom da su na niskim temperaturama magnonske interakcije zanemarljive. Stoga sledi slično ponašanje disperzije kada se razmotri uticaj frustracije, odnosno ciklične interakcije (*Slike 22, 23, 24* i *25*). Međutim, u slučaju ispitivanja uticaja variranja ciklične interakcije na spektar u okviru SCSW pristupa postoji

ANALIZA REZULTATA

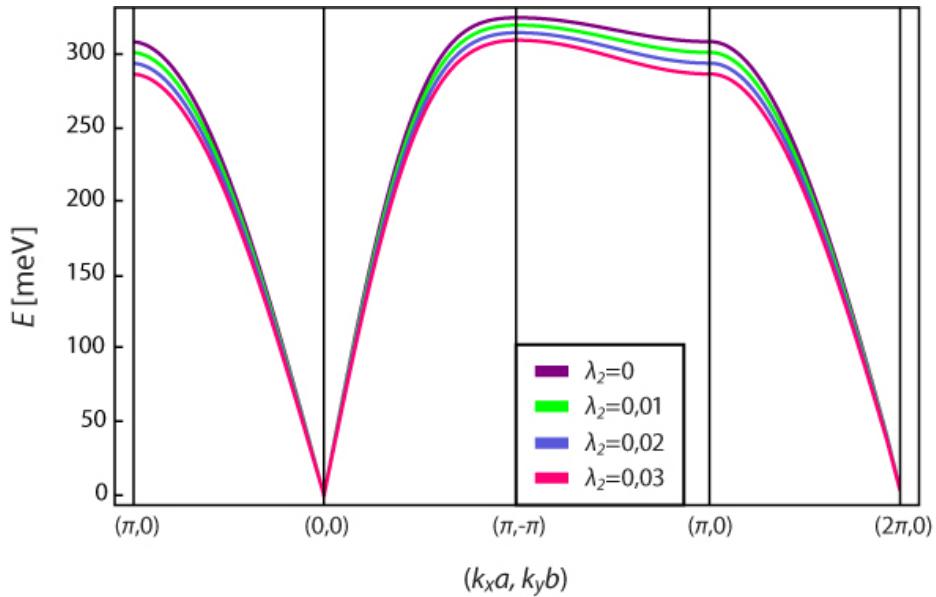
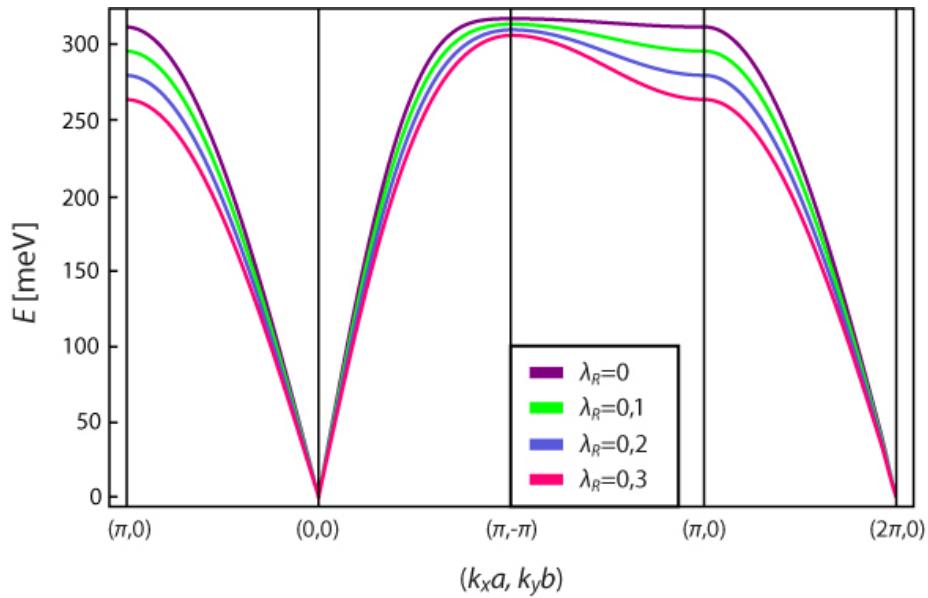
poboljšanje u odnosu na predviđanja koja nalaže LSW teorija. Naime, u LSW pristupu se zapaža da, pri promeni vrednosti λ_R , spektar ostaje nepromenjen u tački $(\pi, -\pi)$ (*Slika 19*, odnosno *Slika 21*). Ovo se ne dešava u SCSW modelu – uočljivo je „spuštanje“ disperzije (*Slika 23*, odnosno *Slika 25*), koje je blaže nego u slučaju kada se posmatra uticaj frustracije, prikazan na *Slici 22* i *Slici 24* za odgovarajuće modele.



Slika 22.: Uticaj frustracije u okviru SCSW teorije za J, J_2, J_3 model iz *Tabele 4*. Ljubičasta kriva predstavlja disperzionu relaciju pri $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$.

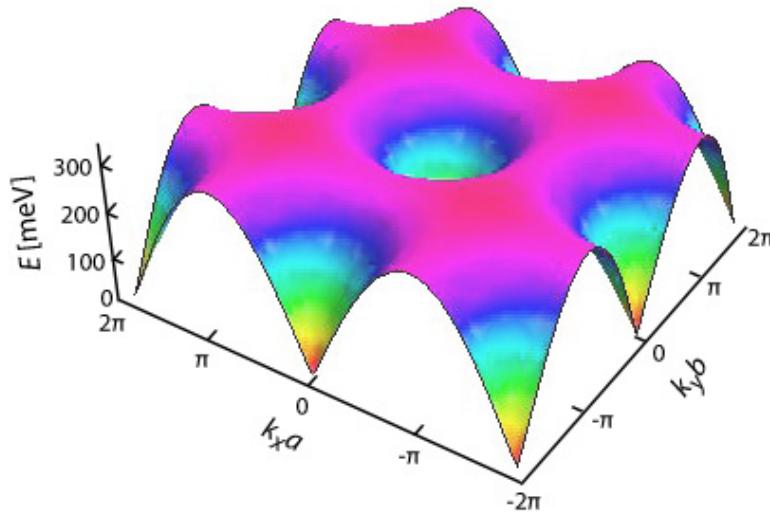


Slika 23.: Uticaj ciklične interakcije u okviru SCSW teorije za J, J_R model iz *Tabele 4*. Ljubičasta kriva predstavlja disperzionu relaciju pri $\lambda_R = 0$.

Slika 24.: Uticaj frustracije u okviru SCSW teorije za J, J_2, J_3, J_R model iz Tabele 4Slika 25.: Uticaj ciklične interakcije u okviru SCSW teorije za J, J_2, J_3, J_R model iz Tabele 4

Konačno, prednost SCSW teorije u pogledu magnonskog spektra je činjenica da korelacione funkcije (6.17) i (6.18) zavise od temperature. S tim u vezi, moguće je sa mousaglašenim postupkom dobiti magnonski spektar na različitim temperaturama.

Na Slici 26 data je površina $E(k_x, k_y)$, koja oslikava periodičnost magnonskih energija u impulsnom prostoru na temperaturi $T = 295\text{ K}$ u SCSW pristupu.



Slika 26.: Spektar magnonskih energija u 3D, za skup parametara koji odgovara vrednostima iz Tabele 4 za J, J_2, J_3, J_R model. Spektar je dat za vrednost temperature $T = 295$ K u okviru SCSW teorije.

S obzirom da su magnonske energije na $T = 295$ K veoma bliske onima na $T = 0$ K, magnonski spektar analogan spektru iz reference [6] (Slika 16) na $T = 295$ K nećemo zasebno prikazivati, već samo 3D spektar, prikazan na Slici 26.

7.2 MAGNETIZACIJA PODREŠETKE U OSNOVNOM STANJU

Na osnovu izraza (5.23) moguće je dobiti vrednosti za magnetizaciju u LSW pristupu za 2D model, a za različite skupove parametara iz Tabele 1. Tako su u Tabeli 5 prikazane dobijene vrednosti za magnetizaciju podrešetke na $T = 0$ K:

Tabela 5.: Vrednosti spontane magnetizacije podrešetke za različite modele (Tabela 1) u LSW pristupu na $T = 0$ K

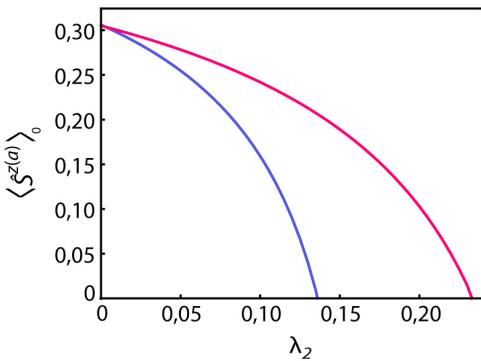
model	J, J_2, J_3	J, J_R	J, J_2, J_3, J_R
$\langle \hat{S}_{LSW}^{z(a)} \rangle_0$	0,234437	0,324386	0,295721

Analognim postupkom se dobijaju vrednosti za spontanu magnetizaciju podrešetke za 2D model u okviru SCSW teorije. Naime, koristeći izraz (6.20), dolazi se do sledećih rezultata prikazanih u Tabeli 6:

Tabela 6.: Vrednosti spontane magnetizacije podrešetke za različite modele (Tabela 4) u SCSW pristupu na $T = 0$ K

model	J, J_2, J_3	J, J_R	J, J_2, J_3, J_R
$\langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$	0,221537	0,325941	0,316622

Vidi se da su popravke za dati model u SCSW u odnosu na LSW pristup male, svega nekoliko procenata. Međutim, na osnovu rezultata iz *Tabele 5* i *Tabele 6* može se zaključiti da postoji kompeticija ova dva uticaja, tj. da frustracija (model J, J_2, J_3) snižava, dok ciklična interakcija (model J, J_R) povećava vrednost spontane magnetizacije [31]. Dakle, uvođenje parametra λ_R favorizuje Nelovo stanje, dok ga parametar $\lambda_2 = \lambda_3$ razuređuje.

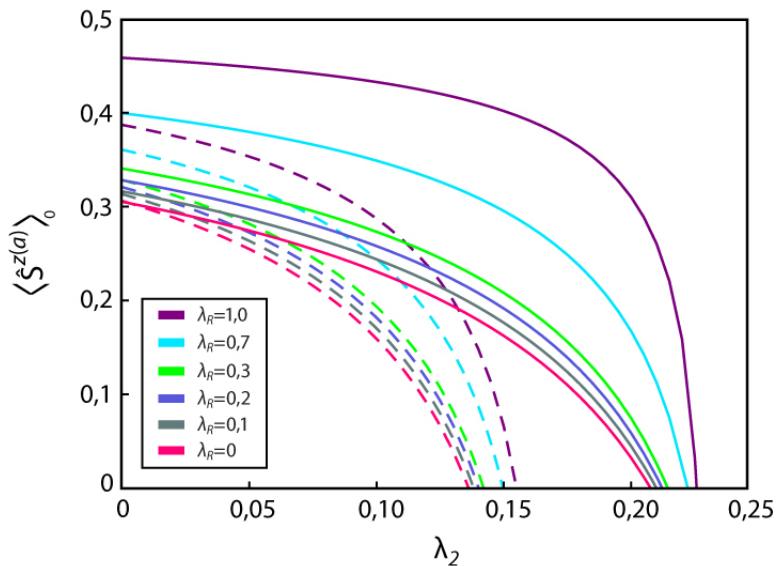


Slika 27.: Zavisnost spontane magnetizacije podrešetke od λ_2 u modelu J, J_2, J_3 . Plava boja predstavlja ponašanje u okviru LSW, a crvena u okviru SCSW teorije.

U cilju potvrde ovog zaključka, moguće je ispitati uticaj frustracije, odnosno ciklične interakcije na ponašanje magnetizacije podrešetke na apsolutnoj nuli.

Ako se pođe od modela J, J_2, J_3 [35], može se dobiti zavisnost magnetizacije od λ_2 u okviru LSW, odnosno SCSW teorije, koja je prikazana na *Slici 27*. Vidi se da se magnetizacija smanjuje sa povećanjem frustracije, kao i da LSW i SCSW vrednosti sve više odstupaju sa ovim povećanjem.

Analogno razmatranje se može sprovesti za slučaj J, J_2, J_3, J_R modela, u koji je uključena i ciklična interakcija. Naime, posmatrajući zavisnost magnetizacije od λ_2 za različite vrednosti λ_R , dobija se sledeći grafik:



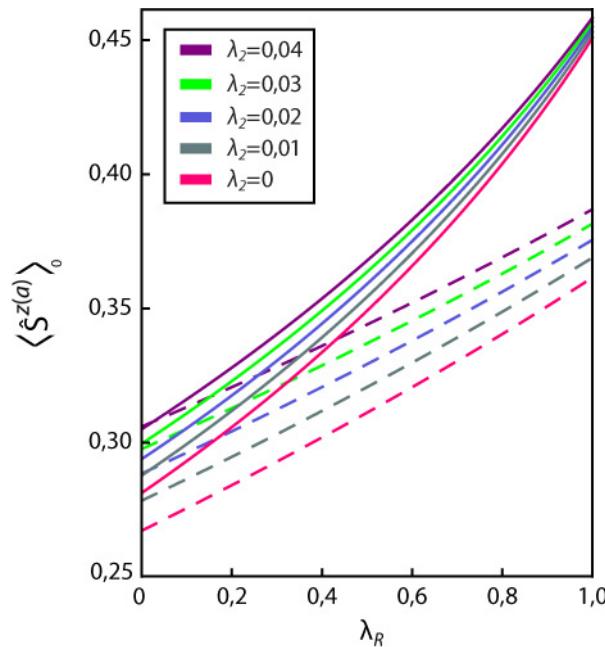
Slika 28.: Zavisnost magnetizacije podrešetke od λ_2 za različite λ_R u modelu J, J_2, J_3, J_R . Isprekidanim linijama su označene LSW vrednosti, dok pune linije predstavljaju SCSW vrednosti. Vrednosti $\lambda_R = 0,7$ i $\lambda_R = 1,0$ ne predstavljaju fizički moguće vrednosti za ovaj parametar, ali su tako izabrane po uzoru na referencu [31] u cilju ispitivanja ponašanja magnetizacije sa povećanjem λ_R .

ANALIZA REZULTATA

Odaberimo, npr. vrednost $\lambda_R = 0,1$, koja je najpričinjija vrednost dobijenoj za model J, J_2, J_3, J_R (Tabela 4) u SCSW pristupu. Za spontanu magnetizaciju, pri $\lambda_2 = 0$, dobija se $\langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_{0,max} = 0,316$, što predstavlja maksimalnu moguću vrednost magnetizacije. Sa Slike 28 se vidi da se pri povećanju λ_2 vrednost magnetizacije podrešetke smanjuje, sve do neke kritične vrednosti $\lambda_2^c = 0,210$ u ovom slučaju. Kako povećavamo vrednost λ_R povećavaće se i ova kritična vrednost za λ_2 . Sa Slike 28 je uočljivo da sa ovim povećanjem λ_R raste i vrednost $\langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_{0,max}$, kao i da su vrednosti u okviru SCSW pristupa veće nego što daje LSW teorija.

Treba još spomenuti da se rezultati dobijeni za maksimalnu vrednost magnetizacije $\langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_{0,max}$ (pri $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$) u SCSW pristupu mogu uporediti sa rezultatima iz reference [31] u okviru teorije perturbacija. Ako se uzmu, recimo, vrednosti $\lambda_R = 0$ i $\lambda_R = 1$, za maksimalnu magnetizaciju podrešetke dobijaju se vrednosti 0,305 i 0,458, dok referenca [31] sugerise vrednosti oko $\sim 0,3$, odnosno $\sim 0,46$, respektivno. Dakle, vidimo da je slaganje prilično dobro za ovaj deo krive (Slika 28).

S druge strane, moguće je, za model J, J_2, J_3, J_R , ispitati i zavisnost magnetizacije podrešetke od λ_R , a za različite vrednosti λ_2 , što je prikazano na Slici 29:



Slika 29.: Zavisnost magnetizacije podrešetke od λ_R za različite λ_2 u modelu J, J_2, J_3, J_R . Isprekidanim linijama su označene LSW vrednosti, dok pune linije predstavljaju SCSW vrednosti.

Zadržimo se na SCSW prilazu. Naime, kako je usled kvantnih fluktuacija vrednost magnetizacije smanjena u odnosu na klasičnu vrednost $\frac{1}{2}$, potrebno je ispitati zavisnost devijacije magnetizacije $\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$ od frustracije, odnosno ciklične interakcije. S tim u vezi, oslonimo se prvo na rezultate sa Slike 28:

Tabela 7.: Devijacija magnetizacije podrešetke u zavisnosti od ciklične interakcije za slučaj J, J_2, J_3, J_R modela u okviru SCSW pristupa

λ_R	0	0, 1	0, 132467	0, 2	0, 3
$\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$	0, 195	0, 1839	0, 1801	0, 1721	0, 1596

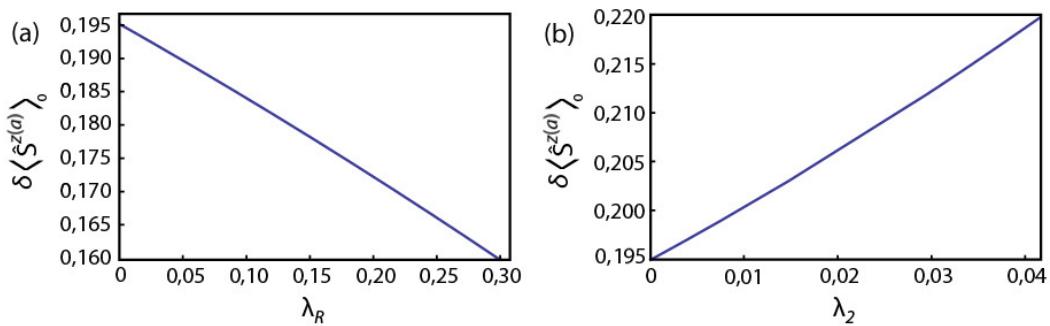
Veličina $\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$ predstavlja razliku između klasične vrednosti $\frac{1}{2}$ i maksimalne vrednosti magnetizacije. U slučaju ispitivanja zavisnosti $\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$ od ciklične interakcije, maksimalna vrednost magnetizacije za zadatu vrednost λ_R se dobija pri $\lambda_2 = \lambda_3 = 0$, što se može videti sa *Slike 28*. Fitovanjem rezultata za $\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$ iz *Tabele 7* dobija se grafik zavisnosti devijacije magnetizacije od ciklične interakcije, prikazan na *Slici 30 (a)*.

Analognim postupkom, pozivajući se na rezultate sa *Slike 29*, dolazi se do rezultata datih u *Tabeli 8*, s tim što se u ovom slučaju maksimalna vrednost za magnetizaciju podrešetke $\langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_{0,max}$ u zavisnosti od frustracije dobija pri $\lambda_R = 0$:

Tabela 8.: Devijacija magnetizacije podrešetke u zavisnosti od frustracije za slučaj J, J_2, J_3, J_R modela u okviru SCSW pristupa

$\lambda_2 = \lambda_3$	0	0, 01	0, 02	0, 025	0, 03	0, 04
$\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$	0, 194925	0, 200335	0, 206078	0, 209085	0, 212187	0, 218699

Na osnovu poslednje kolone u *Tabeli 8* moguće je grafički predstaviti devijaciju magnetizacije u zavisnosti od frustracije (*Slika 30 (b)*):



Slika 30.: Zavisnost devijacije magnetizacije podrešetke od λ_R (a), odnosno od $\lambda_2 = \lambda_3$ (b). U slučaju (a) kriva je dobijena fitovanjem dobijenih podataka i daje funkcionalnu zavisnost $f(\lambda_R) = 0,195 - 0,107747\lambda_R - 0,0341455\lambda_R^2$, dok u slučaju (b) onda zadovoljava jednačinu tipa $g(\lambda_2) = 0,194933 + 0,520246\lambda_2 + 1,84312\lambda_2^2$, gde je $\lambda_2 = \lambda_3$.

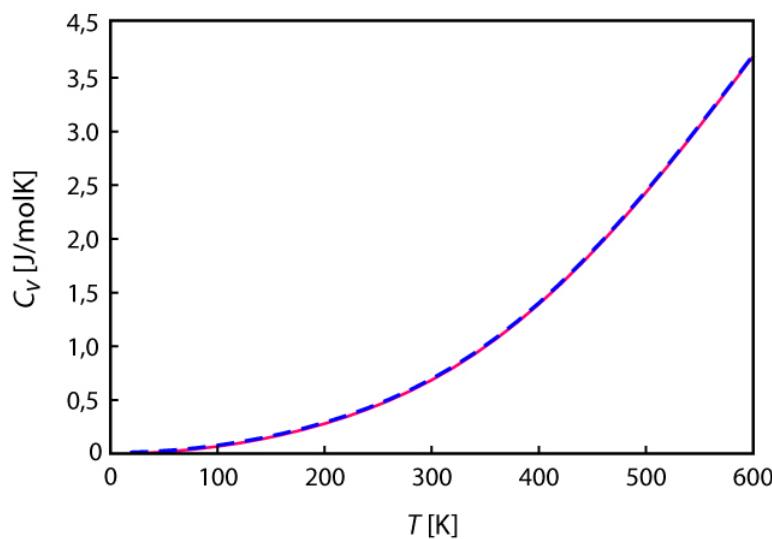
Sa *Slike 30* se može zaključiti sledeće: povećanje frustracije dovodi do povećanja devijacije $\delta \langle \hat{S}_{SCSW}^{z(a)} \rangle_0$. S druge strane, povećanjem ciklične interakcije smanjuje se

ANALIZA REZULTATA

odstupanje spontane magnetizacije od vrednosti $\frac{1}{2}$ [31]. Ovi zaključci su u skladu sa pretpostavljenom prirodnom frustracije, odnosno ciklične interakcije.

7.3 MAGNONSKI DOPRINOS SPECIFIČNOJ TOPLOTI

Izrazi (5.29) za LSW, odnosno (6.21) za SCSW pristup omogućavaju nam da prikažemo grafički temperatursku zavisnost magnonske specifične toplote u širokom temperaturskom intervalu. Pri tome ćemo koristiti skup parametara za model J, J_2, J_3, J_R (Tabele 1 i 4). Rezultat je dat na *Slici 31*:



Slika 31.: Zavisnost specifične topline od temperature. Puna plava linija daje ponašanje u LSW, a isprekidana crvena u okviru SCSW pristupa.

Vidi se da obe teorije, LSW i SCSW, daju gotovo identičnu temperaturski zavisnost specifične topline.

8

ZAKLJUČAK

U ranom periodu istraživanja visokotemperaturske superprovodnosti pretpostavljeno je da su magnetne osobine oksida bakra, koje potiču od spregnutih spinova unutar CuO_2 ravni, usko povezane sa superprovodnošću. Prilikom dopiranja jedinjenja tipa La_2CuO_4 , dugodometno antiferomagnetsno uređenje nestaje, što vodi do kratkodometnih kvantnih korelacija i superprovodnosti. Ovo je razlog zašto su magnetne osobine „roditeljskih“ jedinjenja privlačile veliku pažnju od otkrića superprovodnosti u kupratima.

Najjednostavniji model za izučavanje jedinjenja La_2CuO_4 predstavlja model u kom su prisutne samo interakcije najbližih suseda. Stoga je cilj ovog rada bio ispitati uticaj drugih interakcija, prvenstveno uticaj interakcije drugih suseda i ciklične interakcije na dugodometno uređenje u kupratima, zarad izvođenja što opštijih zaključaka o njihovom magnetnom ponašanju. Kako La_2CuO_4 predstavlja frustrirani sistem, usled kompeticije između interakcija prvih i drugih, odnosno trećih suseda, analizom tih interakcija može se doći do kvalitativnog razumevanja kako određeni skup interakcija proizvodi određeno stanje. Pored toga, interakcije između susednih CuO_2 ravni mogu se zanemariti, te je opravdano ovaj sistem nazivati kvazidvodimenzionalnim i zadržati samo interakcije unutar CuO_2 ravni. Dalje, ispostavilo se da je za $S = \frac{1}{2}$ Hajzenbergov model četvorospinska ciklična interakcija sledeća najjača interakcija nakon interakcije izmene najbližih suseda. U ovom radu ispitana je i uticaj te interakcije na magnetne osobine frustiranog Hajzenbergovog antiferomagneta u osnovnom stanju. Najopštiji zaključak je da ciklična interakcija favorizuje Nelovo stanje, dok frustracija utiče na razuređivanje istog. Ova dva uticaja ispitana su na nekoliko različitih modela, odakle je utvrđeno da su razlike u ponašanju kvantitativnog, a ne kvalitativnog karaktera.

Oksidi bakra se mogu ispitati u okviru različitih teorija. Mi smo analizu sprovedeli u okviru teorije spinskih talasa, najpre u pristupu linearnih spinskih talasa, a potom i

ZAKLJUČAK

u samousaglašenom pristupu. Time smo odredili disperzionu krivu, magnetizaciju i specifični topotni kapacitet. Upoređivanjem magnetnog spektra sa rezultatima dobijenim eksperimentalno zaključili smo da je slaganje vrlo dobro. Prilikom određivanja magnetizacije na apsolutnoj nuli, ispitali smo ponašanje iste za različite vrednosti frustracije, odnosno ciklične interakcije, a potom ispitali uticaj kvantnih fluktuacija na Nelovo stanje.

Konkretno, analiza u okviru teorije linearних spinskih talasa daje dobre rezultate u oblasti niskih temperatura. To je usled činjenice da su magnonske interakcije zanemarive. S druge strane, u pristupu samousaglašene teorije spinskih talasa ovi članovi se ne odbacuju, pa stoga ovaj pristup predstavlja popravku u odnosu na LSW teoriju. Razlika između ova dva pristupa očita je kada se, recimo, poredi magnetizacija u osnovnom stanju, i postaje sve izraženija sa porastom odgovarajuće interakcije. Prednost SCSW teorije je u temperaturskoj zavisnosti magnonske energije koja se krije u korelacionim funkcijama izvedenim u okviru ovog pristupa, što je posledica uračunavanja članova koji se odnose na magnonske interakcije. Ipak, primećeno je da SCSW ne daje uvek primetno poboljšanje u odnosu na LSW u pogledu temperaturskog ponašanja specifične topote. Prema tome, može se zaključiti da pristup u okviru SCSW teorije predstavlja poboljšanje u odnosu na LSW teoriju, ali, s obzirom da to poboljšanje često nije dovoljno veliko da bi opravdalo složenost SCSW pristupa, uglavnom se pribegava pristupu u okviru LSW teorije.

Iako se čini da, za sada, nije moguće dati neku konkretnu teoriju za opisivanje ponašanja interesantnih jedinjenja tipa La_2CuO_4 , postoji težnja za razumevanjem istih s obzirom da se smatra da će ona dovesti do napretka u nauci i tehnologiji. S obzirom da je fizika ovih jedinjenja složena, različite uticaje u okviru različitih modela potrebno je detaljno i pažljivo izučiti. Jedna takva analiza sprovedena je i u ovom radu, što bi moglo dalje da se nastavi u okviru nekih novih teorijskih studija.

A

INTEGRACIJA U INVERZNOM PROSTORU

S obzirom da su sve analize u ovom radu sprovedene za jedinjenje La_2CuO_4 sa ortorombnom magnetnom elementarnom čelijom, ovde će biti date osnovne napomene vezane za konkretno izračunavanje izraza datih u tekstu u vidu sume u impulsnom prostoru.

Prema [18, 20, 36] prelaz sa sume na integral u inverznom prostoru dat je izrazom:

$$\frac{1}{N_d} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{v}{(2\pi)^3} \int_{V_{IBZ}} F(\mathbf{k}) d^d k, \quad (\text{A.1})$$

gde je $N_d = L^d$ broj čvorova (pod)rešetke, d predstavlja dimenzionalnost sistema, v je zapremina elementarne čelije, a integracija se vrši po zapremini impulsnog prostora koja odgovara I Briluenovoj zoni. Definisanje I Briluenove zone (IBZ) se svodi na određivanje Vigner-Zajcove (Wigner-Seitz) čelije u inverznom prostoru. Ako osnovne vektore translacije direktnе rešetke označimo sa \mathbf{a}_i ($i = 1, 2, 3$), tada se osnovni vektori translacije recipročne rešetke \mathbf{b}_i mogu definisati na sledeći način [18, 36]:

$$\begin{aligned} \mathbf{b}_1 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_2 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_3 \times \mathbf{a}_1}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}, \\ \mathbf{b}_3 &= 2\pi \frac{\mathbf{a}_1 \times \mathbf{a}_2}{\mathbf{a}_1 \cdot (\mathbf{a}_2 \times \mathbf{a}_3)}. \end{aligned} \quad (\text{A.2})$$

Zarad određivanja vektora \mathbf{b}_i , podjimo od osnovnih vektora magnetne elementarne čelije u direktnoj rešetki za ortorombnu strukturu:

$$\mathbf{a}_1 = a \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{a}_2 = b \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{a}_3 = c \mathbf{e}_z. \quad (\text{A.3})$$

Ako se (A.3) uvrsti u (A.2) dobijaju se osnovni vektori recipročne rešetke:

$$\mathbf{b}_1 = \frac{2\pi}{a} \mathbf{e}_x, \quad \mathbf{b}_2 = \frac{2\pi}{b} \mathbf{e}_y, \quad \mathbf{b}_3 = \frac{2\pi}{c} \mathbf{e}_z, \quad (\text{A.4})$$

čije poznavanje nam omogućava da konstruišemo IBZ.

Konačno, prelaz sa sume na integral biće dat izrazom:

$$\frac{1}{N_3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{abc}{(2\pi)^3} \int_{-\pi/a}^{\pi/a} \int_{-\pi/b}^{\pi/b} \int_{-\pi/c}^{\pi/c} F(ak_x, bk_y, ck_z) dk_x dk_y dk_z. \quad (\text{A.5})$$

Uvodeći smenu $x_i = a_i k_i$ i koristeći simetriju podintegralne funkcije, (A.5) postaje

$$\frac{1}{N_3} \sum_{\mathbf{k}} F(\mathbf{k}) = \frac{1}{\pi^3} \int_0^\pi \int_0^\pi \int_0^\pi F(x, y, z) dx dy dz. \quad (\text{A.6})$$

S obzirom da je u ovom radu analiza vršena na 2D sistemima, korisno je gornju relaciju izraziti za 2D, pri čemu se dobija

$$\frac{1}{N_2} \sum_{\mathbf{k}_{||}} F(\mathbf{k}_{||}) = \frac{1}{\pi^2} \int_0^\pi \int_0^\pi F(x, y) dx dy. \quad (\text{A.7})$$

Integrali tipa (A.6) u opštem slučaju nisu rešivi analitički, te su rešavani numerički u okviru programskog paketa *Wolfram Mathematica 9*.

LITERATURA

- [1] J. G. Bednorz, K. A. Müller, *Z. Physik B* **64**, 189 (1986)
- [2] E. Dagotto, *Rev. Mod. Phys.* **66**, 763 (1994)
- [3] F. S. Galasso, Structure, Properties and Preparation of Perovskite-Type Compounds, Pergamon Press, New York (1969)
- [4] D. C. Mattis, Theory of Magnetism I, Springer-Verlag, Berlin (1988)
- [5] R. J. Birgeneau, M. Greven, M. A. Kastner, Y. S. Lee, B. O. Wells, Y. Endoh, K. Yamada, G. Shirane, arXiv:cond-mat/9903124 v1 (1999)
- [6] R. Coldea, S. M. Hayden, G. Aeppli, T. G. Perring, C. D. Frost, T. E. Mason, S. W. Cheong, Z. Fisk, *Phys. Rev. Lett.* **86**, 5377 (2001)
- [7] N. S. Headings, S. M. Hayden, R. Coldea, T. G. Perring, *Phys. Rev. Lett.* **105**, 247001 (2010)
- [8] B. M. Mustafa, Study of Substitution Mechanism in the Superconductor La_2CuO_4 , Mosul University (2009)
- [9] Ž. Kovačević, Uticaj primjesa na elektronsku strukturu CuO_2 ravni visokotemperaturnih superprovodnika (prema materijalima doktorske teze), Prirodno-matematički fakultet, Podgorica (2000)
- [10] C. J. Peters, R. J. Birgeneau, M. A. Kastner, H. Yoshizawa, J. Endoh, J. Tranquada, G. Shirane, Y. Hidaka, M. Oda, M. Suzuki, T. Murakami, *Phys. Rev. B* **37**, 9761 (1988)
- [11] N. F. Mott, *Rev. Mod. Phys.* **40**, 677–683 (1968).
- [12] L. F. Mattheiss, *Phys. Rev. Lett.* **58**, 1028–1030 (1987).
- [13] B. Keimer, A. Aharony, A. Auerbach, R. J. Birgenau, A. Cassanho, Y. Endoh, R. W. Erwin, M. A. Kastner, G. Shirane, *Phys. Rev. B* **45**, 7430 (1992)

Literatura

- [14] J. Rossat-Mignod, L. P. Regnault, P. Bourges, P. Burlet, C. Vettier, J. Y. Henry, Frontiers in Solid State Sciences: Magnetism and Superconductivity, World Scientific, Singapore (1994)
- [15] H. Tasaki, Prog. Theor. Phys. **99** 489 (1998) (cond-mat/9712219)
- [16] H. Tasaki, Eur. Phys. J. B **64** 365 (2008)
- [17] A. Altland, B. Simons, Condensed Matter Field Theory, Cambridge University Press, (2006)
- [18] M. Pantić, Predavanja iz Osnova teorije kondenzovanog stanja (skripta), Prirodno–matematički fakultet, Novi Sad
- [19] J. Hubbard, Proc. Roy. Soc., London A **276** 238 (1963)
- [20] K. Yosida, Theory of Magnetism, Springer-Verlag, New York (1996)
- [21] S. Radošević, Magnetne osobine antiferomagnetnih halogenida mangana (master rad), Prirodno–matematički fakultet, Novi Sad (2009)
- [22] M. Imada, A. Fujimori, Y. Tokura, Rev. Mod. Phys. **70**, 1059 (1998)
- [23] A. Auerbach, Interacting Electrons and Quantum Magnetism, Springer-Verlag (1994)
- [24] J. Sólyom, Fundamentals of the Physics of Solids Volume I, Structure and Dynamics, Springer (2002)
- [25] E. Manousakis, Rev. Mod. Phys. **63**(1), 1-63 (1991)
- [26] M. Takahashi, Phys. Rev. B **40**, 2494 (1989)
- [27] A. Kreisel, Spin-wave calculations for Heisenberg magnets with reduced symmetry, Frankfurt (2011)
- [28] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102**, 1217 (1956)
- [29] G. Shirane et al., Phys. Rev. Lett. **59**, 1613 (1987)
- [30] A. A. Katanin, A. P. Kampf, Phys. Rev. B **66**, 100403(R) (2002)
- [31] K. Majumdar, Phys. Rev. B **85**, 144420 (2012)
- [32] B. G. Liu, Phys. Rev. B **41**, 9563 (1990)

- [33] K. Sun, J. H. Cho, F. C. Chou, W. C. Lee, L. L. Miller, D. C. Johnston, Y. Hidaka, T. Murakami, Phys. Rev. B **43**, 239 (1991)
- [34] D. Stanek, Phys. Rev. B **84**, 064505 (2011)
- [35] K. Majumdar, Phys. Rev. B **82**, 144407 (2010)
- [36] C. Kittel, Quantum Theory of Solids, John Wiley Sons, inc., New York (1963)

BIOGRAFIJA



Maja Berović rođena je 24.12.1989. u Sarajevu, Bosna i Hercegovina. Osnovnu školu "Sonja Marinković" završava 2004. god. Potom upisuje gimnaziju "Svetozar Marković" u Subotici, koju završava 2008. god. Iste godine upisuje se na redovne studije Prirodno-matematičkog fakulteta u Novom Sadu, odsek fizika – istraživač. Akademске 2009/2010. i zimski semestar 2010/2011. god. učestvuje u programu razmene studenata "Campus Europae". Osnovne studije završava 2013. god. sa prosekom 9,48. Iste godine upisuje master studije Teorijske fizike kondenzovane materije na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novom Sadu. U toku akademske 2013/2014. polaže sve ispite predviđene planom i programom sa prosečnom ocenom 9,8 i time stiče pravo da brani master rad i stekne diplomu i zvanje mastera teorijske fizike kondenzovane materije.

Novi Sad, oktobar 2014.

Maja Berović

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije:

TD

Tip zapisa:

TZ

Vrsta rada:

VR

Autor:

AU

Mentor:

MN

Naslov rada:

NR

Monografska dokumentacija

Tekstualni štampani materijal

Diplomski rad

Maja Berović, br. dos. 461M/13

Doc. Milica Rotonjski

Ispitivanje uticaja frustracije i ciklične interakcije na Hajzenbergov antiferomagnet tipa La_2CuO_4 u okviru samousaglašene teorije spinskih talasa

Jezik publikacije:

JP

Jezik izvoda:

JI

Zemlja publikovanja:

ZP

Uže geografsko područje:

UGP

Godina:

GO

Izdavač:

IZ

Mesto i adresa:

MA

Fizički opis rada:

FO

Naučna oblast:

NO

Naučna disciplina:

ND

Predmetna odrednica/ ključne reči:

Fizika

Teorijska fizika kondenzovane materije

Hajzenbergov antiferomagnet, Teorija spinskih talasa, frustracija, ciklična interakcija, magnonski spektri, magnetizacija, magnonska specifična toplota

PO

UDK

Čuva se:

Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu

ČU

Važna napomena:

—

VN

Izvod:

IZ

Datum prihvatanja teme od NN veća:

DP

Datum odbrane:

27.10.2014.

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik:

dr Milan Pantić, redovni profesor, Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu

član:

dr Milica Rutonjski, docent, Prirodno-matematički fakultet u Novom

član:

dr Slobodan Radošević, docent, Prirodno-matematilki fakultet u Novom

Sadu

član:

dr Dušan Mrđa, vanredni profesor, Prirodno-matematilki fakultet u Novom

Sadu

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type:

DT

Monograph publication

Type of record:

TR

Textual printed material

Content code:

CC

Final paper

Author:

AU

Maja Berović

Mentor/comentor:

MN

Milica Rutonjski

Title:

TI

Study of effect of frustration and ring exchange interaction on the Heisenberg antiferromagnet of La_2CuO_4 type within self-consistent spin wave approach

Language of text:

LT

Serbian (Latin)

Language of abstract:

LA

English

Country of publication:

CP

Serbia

Locality of publication:

LP

Vojvodina

Publication year:

PY

2014

Publisher:

PU

Author's reprint

Publication place:

PP

Faculty of Science and Mathematics, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

Physical description:

PD

5/182/32/0/71/0/3

Scientific field:

SF

Physics

Scientific discipline:

SD

Solid state theory

Subject/ Key words:

SKW

Haisenberg antiferromagnet, Spin Wave Theory, frustration, ring interaction, magnon spectra, magnetization, magnon specific heat

UC

Holding data:

HD

Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4

Note:

N

—

Abstract:

AB

Accepted by the Scientific Board:

ASB

Defended on:

27.10.2014.

DE

Thesis defend board:

DB

President:

dr Milan Pantić, full professor, Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu

Member:

dr Milica Rutonjski, docent, Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu

Member:

dr Slobodan Radošević, docent, Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu

Member:

dr Dušan Mrđa, associate professor, Prirodno-matematički fakultet u Novom Sadu