



UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
DEPARTMAN ZA FIZIKU



Teorijski modeli za magnetne osobine pniktida gvoždja

-master rad-

Mentor: dr Milan Pantić

Kandidat: Milan Vujinović

Novi Sad, 2011

Sadržaj

Uvod	3
1 Pniktidi gvoždja i teorijski modeli	7
1.1 Osnovne osobine i struktura pniktida gvoždja	7
1.2 Teorijski prilazi i modelni Hamiltonijan	10
2 Spinski formalizam i RPA pristup	17
2.1 Jednačine kretanja i Grinove funkcije	17
2.2 Jednačine kretanja i zakon disperzije u RPA	20
2.3 Magnetizacija u RPA	23
3 Bozonizacija i LSW pristup	29
3.1 Reprezentacija Dajson-Maljejeva	29
3.2 Zakon disperzije i magnetizacija u Blohovoju aproksimaciji	31
4 Numerička analiza rezultata	35
4.1 Magnetizacija	35
4.2 Zakon disperzije i Goldstonov mod	37
5 Zaključak	45
A RPA analiza za $J_1 = -J_1^F$	47
B Integracija po I Brilluenuvoj zoni	51
C Grinove funkcije i spektralna teorema	55
C.1 Neravnotežne srednje vrednosti operatora	55
C.2 Retardovane, avansovane i kauzalne Grinove funkcije	57
C.3 Jednačine kretanja za Grinove funkcije	58
C.4 Spektralna teorema	60

Uvod

Početak 2008. godine otkrivena je visokotemperaturna superprovodnost u pniktidima gvoždja. Time počinje novo poglavlje u izučavanju fenomena visokotemperaturne superprovodnosti. Pnktidi gvoždja su prvi materijali nakon bakarnih oksida kod kojih je registrovan ovaj fenomen.

Ovo otkriće pokrenulo je neka fundamentalna pitanja. Najpreče pitanje je da li je mehanizam visokotemperaturne superprovodnosti u pniktidima gvoždja na neki suštinski način povezan sa istim mehanizmom u bakarnim oksidima.

Postoji nekoliko sličnosti između pniktida gvoždja i bakarnih oksida. Kod obe grupe materijala postoji slojevita struktura i veruje se da sloj prelaznih metala igra presudnu ulogu u mehanizmu superprovodnosti. Kod obe grupe je prisutan magnetizam koji se uklanja dodavanjem primesa. Takođe, i pnktidi gvoždja i bakarni oksidi postaju superprovodni na visokim temperaturama nakon dodavanja primesa.

Medjutim, dok su bakarni oksidi na sobnoj temperaturi izolatori, pnktidi gvoždja su loši metali. Za opis magnetnih osobina bakarnih oksida se uglavnom sa velikim uspehom koristi Hajzenbergov model. Pošto su pnktidi gvoždja na sobnoj temperaturi metali (makar i loši), nije sasvim jasno da li je za modelovanje njihovih magnetnih osobina potrebno koristiti kolektivni model magnetizma, koji više pristaje provodnicima, ili model dobro lokalizovanih i jako korelisanih elektrona, koji je prigodniji za izolatore.

Najbolji model za pnktide gvoždja bi verovatno bio neki u kome se kombinuju kolektivni i lokalizovani stepeni slobode. Medjutim, još uvek nije poznato kako se ovo može praktično postići. Zato se pri modelovanju uglavnom bira neki od dva granična slučaja i o primenljivosti modela se sudi upoređivanjem teorijskih rezultata sa eksperimentom. U ovom radu korišćena je slika dobro lokalizovanih elektrona tj. spinova koji se nalaze na čvorovima kristalne rešetke. Ovo je Hajzenbergov model (anti)feromagnetizma. O modelnom Hamiltonijanu i opravdanosti njegove upotrebe više reči će biti dalje u radu.

Neutronsom difrakcijom je utvrđeno da su u magnetnoj fazi kod pniktida gvoždja spinovi uređeni u tzv. trakastom spinskom poretku (columnar spin stripe). U ovom poretku u jednoj koloni spinovi dominantno pokazuju u jednom smeru a u susednoj koloni dominantno pokazuju u suprotnom smeru. Ovakav poredak vlada u jednoj ravni, a puna trodimenziona struktura se dobija slaganjem ovakvih ravni jedna preko druge. Trakasti spinski poredak unutar ravni se može teorijski opisati pomoću $J_1 - J_2$ Hajzenbergovog antiferomagnetnog modela. U radu je uzeta u obzir i slaba interakcija između samih ravni, preko integrala izmene J_c . Motivacija za proučavanje magnetnih osobina pniktida gvoždja leži pre svega u uverenju da su magnetne osobine ovih materijala tesno povezane sa mehanizmom visokotemperaturne superprovodnosti.

Modelni Hamiltonijan i dinamika koja iz njega sledi su analizirani uz pomoć dve metode. U prvoj metodi korišćen je pun spinski formalizam u aproksimaciji slučajnih faza (random phase approximation, RPA). U drugom metodu Hamiltonijan je 'bozonizovan' uz pomoć reprezentacije

Dajson-Maljejeva i zadržani su samo članovi kvadratni po Boze-operatorima (linear spin wave, LSW pristup). U oba modela korišćene su Grinove funkcije za dobijanje magnetizacije, disperzije magnona i brzina spinskih talasa duž različitih osa. Sve analize su sprovedene za $T = 0K$. Na kraju je diskutovano slaganje dobijenih rezultata sa eksperimentalnim podacima i zaključeno je da izotropni Hajzenbergov $J_1 - J_2 - J_c$ model ne opisuje sasvim zadovoljavajuće pniktide gvoždja. Neki detalji manje bitni za glavni tok rada su naknadno dati u Prilozima. U Prilogu A data je analiza rezultata u spinskom formalizmu za nešto drugačiji izbor parametara modela. U Prilogu B dato je objašnjenje prelaza sa sume na integral u I Brilluenovoj zoni. U Prilogu C dat je dokaz spektralne teoreme. Osim ako nije drugačije naglašeno, jednačine i formule u radu su date u sistemu jedinica u kome važi $\hbar = k_B = 1$.

Glava 1

Pniktidi gvoždja i teorijski modeli

1.1 Osnovne osobine i struktura pniktida gvoždja

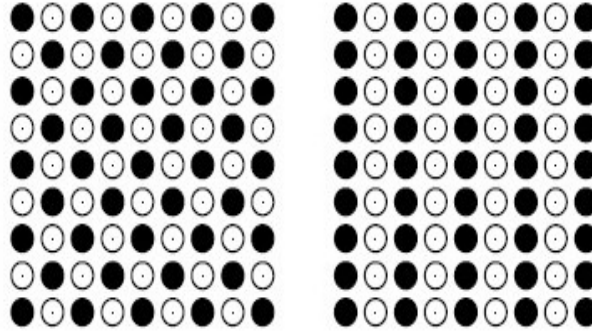
Pod pniktidima gvoždja se podrazumevaju jedinjenja koja sadrže slojeve gvoždja i nekog pniktida. Pniktidi su elementi tzv. azotne grupe periodnog sistema, u koju spadaju azot, fosfor, arsen, antimon i bizmut. Naziv 'pniktid' potiče od grčkog *pnigein*, što znači 'gušiti', i asocira na azot koji može izazvati gušenje.

Uprkos tome što naziv 'pniktid' obuhvata 5 hemijskih elemenata, (od kojih su svakako najznačajniji azot i fosfor), pod pniktidima gvoždja se u fizici gotovo isključivo misli na jedinjenja koja sadrže gvoždje i arsen, odnosno slojeve FeAs. Razlog za ovakvo favorizovanje arsena u odnosu na druge pniktide leži u činjenici da je početkom 2008. godine otkrivena visokotemperaturna superprovodnost u jedinjenjima baziranim na FeAs grupi. Mi ćemo se u ovom radu baviti isključivo arsenidima gvoždja. No, treba uzeti u obzir i da svi pniktidi imaju 5 valentnih elektrona i slične kristalohemijske osobine. Zato očekujemo da rezultati koje dobijemo u ovom radu imaju opštiji značaj i da se u principu mogu primeniti na sve pniktide gvoždja kod kojih eventualno bude registrovano postojanje trakastog spinskog poretka.

Prva jedinjenja koja sadrže slojeve FeAs i kod kojih je registrovana superprovodnost imala su oblik ReOFeAs, gde je Re neki element iz grupe retkih zemalja. Niskotemperaturna superprovodnost je prvo otkrivena kod LaOFeAs, sa $T_c = 3.5K$. Ubrzo nakon toga je otkriveno da se kritična temperatura može znatno podići dopiranjem, odnosno zamenjivanjem kiseonika fluorom ili nekim drugim elementom iz grupe retkih zemalja. Trenutni 'rekorder' u ovoj grupi je jedinjenje $SmO_{1-x}F_xFeAs$, sa $T_c = 55K$ [1]. Tipičan predstavnik ove grupe jedinjenja je LaOFeAs, o kojem će najviše i biti reči u ovom radu.

Posle jedinjenja oblika ReOFeAs brzo su otkrivena jedinjenja tipa AFe_2As_2 , ($A=Ba, Sr, Ca$), koja sadrže dvostruke slojeve FeAs. Sve do otkrića ove klase jedinjenja pniktidi gvoždja su se često nazivali i oksipniktidi zbog do tada 'obaveznog' prisustva kiseonika. Treću klasu jedinjenja baziranih na FeAs grupi čini samo jedinjenje LiFeAs, kod kojeg su ravni FeAs razdvojene slojevima litijuma. Zanimljivost vezana za LiFeAs je da se u njemu superprovodnost javlja na relativno visokoj temperaturi od $T_c = 18K$ bez ikakvog dopiranja. Ove tri klase jedinjenja čine pniktide gvoždja.

U eksperimentima neutronske difrakcije,^{2,3} mionske spinske rezonance⁴ i Mosbauerove spektroskopije⁵ utvrđeno je postojanje dugodometnog magnetnog uredjenja u $La(Nd)OFeAs$ i AFe_2As_2 . Magnetno uredjenje javlja se u vidu trakastog spinskog poretka. U ovom poretku



Slika 1: 'Običan' AFM poredak (levo) i trakasti spinski poredak (desno)

u jednoj koloni spinovi dominantno pokazuju u jednom smeru a u susednoj koloni dominantno pokazuju u suprotnom smeru. Razlika između ovakvog poretka i 'običnog' antiferomagnetskog poretka je ilustrovana na Slici 1. Crni i beli krugovi su spinovi sa međusobno suprotnim orijentacijama.

Magnetno uredjenje tj. prelaz iz paramagnetne u antiferomagnetnu fazu se kod svih pniktida gvoždja javlja u temperaturnom intervalu od 100 do 200 K [6]. Za LaOFeAs, na primer, Nelova temperatura (temperatura na kojoj se javlja antiferomagnetni fazni prelaz) iznosi $T_N = 140K$. Kod klase jedinjenja AFe_2As_2 magnetni fazni prelaz se javlja na istoj ili nešto nižoj temperaturi od strukturnog faznog prelaza iz tetragonalne u ortorombičnu strukturu. Činjenica da se magnetni i strukturni fazni prelaz javljaju na istoj ili skoro istoj temperaturi nas upućuje na ideju da su ova dva prelaza povezana. Pri tome, magnetno uredjenje, odnosno 'blizina' magnetnog uredjenja može biti uzrok strukturnog faznog prelaza (scenario A). U tom scenariju strukturni fazni prelaz bi bio povezan sa narušenjem Z_2 simetrije (nematski prelaz) koje se javlja u fazi sa trakastim uredjenjem. Može važiti i obrnuta situacija, da je strukturni fazni prelaz uzrok magnetnog uredjenja (scenario B). Moguće je i, mada malo verovatno, da ova dva prelaza nisu ni u kakvoj vezi (scenario C).

Obzirom da je ortorombična promena vrlo mala (reda delića jednog procenta), mi ćemo je pri teorijskoj analizi potpuno zanemariti. Drugim rečima, u ovom radu ćemo ignorisati strukturni fazni prelaz i smatraćemo da je struktura kristalne rešetke AFe_2As_2 u magnetnoj fazi tetragonalna, kao i kristalna rešetka jedinjenja tipa ReOFeAs. Ovakav pristup ima smisla samo ako su tačni scenario A ili scenario C. U slučaju važenja scenarija B ignorisanjem strukturnog faznog prelaza ignorišemo i mogućnost pojave magnetnog uredjenja. Postoje i neki eksperimentalni rezultati koji nagoveštavaju da LaOFeAs takodje doživljava strukturni fazni prelaz, menjajući strukturu iz tetragonalne u monokličnu ispod 155 K [2]. Ovakve strukturne fazne prelaze, ako se javljaju, ćemo takodje ignorisati.

Ako se u jedinjenjima tipa ReOFeAs kiseonik počne zamenjivati fluorom ili nekim elementom iz grupe retkih zemalja, dolazi do drastičnog opadanja Nelove temperature sa porastom koncentracije primesa. Za neku kritičnu vrednost koncentracije primesa dugodometno magnetno uredjenje nestaje i materijal prelazi u superprovodno stanje. Kod LaOFeAs, pri zameni kiseonika fluorom, kritična koncentracija fluora koja dovodi do prelaska u superprovodno stanje iznosi $x \sim 0.1$.

Slična situacija se javlja kod bakarnih oksida. Tipičan predstavnik bakarnih oksida je La_2CuO_4 , kod kojeg je takodje prisutno antiferomagnetno uređenje. Zamenjivanjem lantana stroncijumom ovaj materijal prelazi u superprovodno stanje za neku kritičnu koncentraciju stroncijuma.

Kod bakarnih oksida i pniktida gvoždja dopiranjem se unose nosioci naelektrisanja (elektroni ili šupljine) koji potiskuju magnetno uređenje i stvaraju uslove za formiranje Kuperovih parova. Ovo je podstaklo ideju da je kod jedinjenja na bazi FeAs grupe, kao i kod bakarnih oksida, visokotemperaturna superprovodnost povezana sa činjenicom da je sistem blizu magnetnom faznom prelazu i da nosioci naelektrisanja formiraju Kuperove parove preko spinskih fluktuacija. Elektron-fonon interakcija se može odbaciti kao mehanizam formiranja parova jer su računi pokazali da bi se u tom slučaju dobijale kritične temperature T_c znatno niže od onih koje merimo kod bakarnih oksida i pniktida gvoždja.

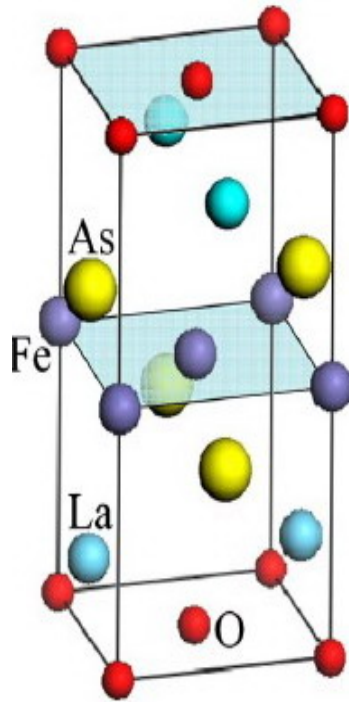
Analogija izmedju jedinjenja na bazi FeAs grupe i bakarnih oksida postaje još očiglednija ako im se uporede kristalne strukture. Kod jedinjenja zasnovanih na FeAs, slojevi FeAs su razdvojeni slojevima ReO (kod ReOFeAs) ili Ca, Br i Sr (kod AFe_2As_2), slično kao što su kod bakarnih oksida slojevi CuO_2 razdvojeni slojevima La- ili Y-Ba. Zbog ovakve slojevite strukture, kod obe grupe jedinjenja prisutna je jaka anizotropija i elektronska stanja su kvazidvodimenziona, sa vrlo slabom interakcijom elektronskih stanja koja pripadaju različitim slojevima [1]. Kristalna struktura LaOFeAs prikazana je na Slici 2. Parametri kristalne rešetke za LaOFeAs su: $a = 4.035 \cdot 10^{-10}\text{m}$, $c = 8.740 \cdot 10^{-10}\text{m}$. Drugi elementi iz grupe ReOFeAs imaju vrednosti parametara vrlo bliske ovim.

U vezi sa strukturom LaOFeAs i svih ostalih jedinjenja koja sadrže slojeve FeAs, treba istaći da je svaka ravan FeAs zapravo trostruki sendvič čiji je srednji sloj kvadratna rešetka Fe atoma, a ispod i iznad se nalaze kvadratne rešetke As atoma koje su smaknute tako da je svaki atom Fe okružen tetrahedronom As atoma.

Kristalohemijske osobine LaOFeAs su određene konfiguracijom spoljašnjih elektronskih ljuski: $\text{Fe}(4s\ 4p\ 3d)$, $\text{As}(4s\ 4p)$, $\text{La}(6s\ 5d\ 4f)$, $\text{O}(2s\ 2p)$. Formalno se valence atoma u ovom jedinjenju mogu zapisati na sledeći način: $\text{La}^{3+}\text{O}^{2-}\text{Fe}^{2+}\text{As}^{3-}$. Nosilac magnetnih osobina je jon Fe^{2+} , pa se u ilustrovanju magnetne rešetke LaOFeAs uglavnom prikazuju samo ovi joni. Magnetizam, odnosno spinovi na Fe čvorovima potiču od spinova nesparenih elektrona iz $3d$ ljuski. Rezultati u okviru zonske teorije predviđaju da po Fe čvoru mogu postojati najviše dva nesparena elektrona [7, 8]. Slojevi koji razdvajaju FeAs ravni ne pokazuju magnetne osobine, što uslovljava kvazidvodimenzionu prirodu magnetne rešetke. Magnetnu rešetku kojom opisujemo LaOFeAs i slična jedinjenja ćemo prikazati malo kasnije, kad budemo diskutovali modelni Hamiltonijan.

Uprkos iznetim sličnostima izmedju bakarnih oksida i pniktida gvoždja, analogija izmedju ove dve familije materijala nije potpuna. Već smo spomenuli da su bakarni oksidi na sobnim temperaturama izolatori, dok su pniktidi gvoždja loši metali ili polumetali sa veoma malom Fermijevom površinom. Takodje, u vezi sa visokotemperaturnom superprovodnošću kod pniktida postoje neke specifičnosti koje nemaju nikakvu analogiju kod bakarnih oksida. Na primer, pokazano je da kod jedinjenja CaFe_2As_2 potiskivanje magnetnog uređenja i prelazak u superprovodno stanje može da se postigne povećanjem pritiska, bez ikakvog dopiranja [6]. Ovakav fenomen kod bakarnih oksida još nije registrovan.

Na kraju ovog odeljka spomenimo još samo postojanje jedinjenja sa osobinama vrlo sličnim pniktidima gvoždja, koji su dobri kandidati da postanu najnovija grupa materijala sa visokotemperaturnom superprovodnošću. U tu grupu spadaju FeSe, FeS i FeTe. Ova jedinjenja



Slika 2: Struktura LaOFeAs

su bazirana na slojevima gvoždja i halogenida, u kojima Fe formira kvadratnu rešetku i svaki atom gvoždja je okružen oktahedrom halogenida. Kod ovih jedinjenja ne postoji središnji sloj izgrađen od drugačijih elemenata. Za sada, pripadnici ove grupe ispoljavaju samo niskotemperaturnu superprovodnost ($T_c = 27K$ kod FeSe), ali je verovatno samo pitanje vremena kad će biti pronađen način da se dovedu u režim visokotemperaturne superprovodnosti.

1.2 Teorijski prilazi i modelni Hamiltonijan

Spomenute sličnosti i razlike između bakarnih oksida i pniktida gvoždja nas dovodi do pitanja koliko su elektronske korelacije bitne kod pniktida gvoždja tj. da li da za opis njihovih magnetnih osobina koristimo kolektivizovani model magnetizma ili sliku dobro lokalizovanih i jako korelisanih elektrona, odnosno spinova.

Prvi teorijski proračuni vezani za elektronsku strukturu i magnetne momente kod pniktida gvoždja obavljani su uz pomoć LDA (local density approximation) metoda. U ovim metodama elektronske korelacije se u potpunosti zanemaruju. LDA pristup je bio donekle uspešan, ali jedna od glavnih 'boljki' ovog pristupa u vezi sa pniktidima gvoždja je činjenica da su magnetni momenti izračunati uz pomoć ovih metoda znatno veći od onih koje daje eksperiment. U Tabeli 1 su upoređeni magnetni momenti izračunati LDA metodama i oni dobijeni eksperimentima. Računi vezani za zonsku strukturu kod pniktida gvoždja su predvideli da osnovno antiferomagnetno trakasto uredjenje ima najnižu energiju, odnosno da je ovo osnovno stanje najstabilnije kod pniktida gvoždja [7]. Ovo je izuzetan teorijski uspeh jer je time predviđeno postojanje trakastog spinskog uredjenja u pniktidima i pre nego što su stigli prvi eksperimentalni rezultati o magnetnom uredjenju. Međutim, rezultati u okviru zonske teorije predviđaju magnetne momente do $2.3 \mu_B$ po Fe čvoru,^{7,10} što je još lošije od predviđanja LDA metoda. Neuspeh

TABELA 1: Usporedjivanje magnetnih momenata dobijenih LDA metodama sa eksperimentalnim vrednostima

Materijal	LDA moment ⁹ (μ_B)	Eksp. moment (μ_B)
LaOFeAs	1.69	0.36
NdOFeAs	1.49	0.25
CaFe ₂ As ₂	1.51	0.80
BaFe ₂ As ₂	1.68	0.87
SrFe ₂ As ₂	1.69	1.01

LDA i sličnih metoda nije jedini razlog da zanemarivanje elektronskih korelacija kod pniktida gvoždja smatramo neopravdanim. Postoje brojni eksperimentalni dokazi da su ovi materijali po osobinama bliski Motovim izolatorima. LaOFeAs, na primer, ima relativno veliki električni otpor, $\rho \approx 5 \text{ m}\Omega\text{cm}$ [11]. Takodje, kod ovog jedinjenja nema Drude pika u izmerenoj optičkoj provodnosti [12]. Sa čisto teorijskog stanovišta, postoje računi koji pokazuju da bi kulonovsko odbijanje na svakom čvoru kod pniktida gvoždja trebalo da bude dosta jako, što znači da se ovi materijali nalaze na samoj granici da budu punopravni Mot-Habardovi izolatori.

Ove činjenice ukazuju na to da LaOFeAs i njemu srodna jedinjenja mogu bar približno da se tretiraju kao Mot-Habardovi izolatori, i da u njihovom teorijskom opisu treba uzeti u obzir elektronske korelacije. Jedan od najjednostavnijih modela u magnetizmu koji uzima u obzir lokalizovanu prirodu elektronskih interakcija je Habardov model, dat Hamiltonijanom [13]:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}, \sigma} t_{\mathbf{ij}} C_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{j}\sigma} + U \sum_{\mathbf{i}} n_{\mathbf{i}\uparrow} n_{\mathbf{i}\downarrow} \quad (1.1)$$

Prvi deo Hamiltonijana opisuje 'skakanje' elektrona sa jednog čvora kristalne rešetke na drugi, a drugi deo opisuje Kulonovsku interakciju elektrona koji se nalaze na istom čvoru. $C_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger$ i $C_{\mathbf{i}\sigma}$ su fermionski operatori koji, respektivno, kreiraju i anihiliraju elektron na čvoru \mathbf{i} sa spinom $\sigma = \uparrow, \downarrow$, a $n_{\mathbf{i}\sigma} = C_{\mathbf{i}\sigma}^\dagger C_{\mathbf{i}\sigma}$ je operator broja elektrona na čvoru \mathbf{i} sa spinom σ .

Vidimo da Habardov model sadrži dva parametra: parametar $t_{\mathbf{ij}}$ koji karakteriše verovatnoću prelaza elektrona sa čvora \mathbf{i} na čvor \mathbf{j} , i parametar U , koji karakteriše kulonovsko odbijanje elektrona koji se nalaze na istom čvoru. Uslov $U \geq 2zt$, gde je z broj najbližih suseda (koordinacioni broj), odgovara slučaju jakih korelacija. Može se pokazati da je pri važenju uslova $U \gg t_{\mathbf{ij}}$, Habardov Hamiltonijan ekvivalentan Hajzenbergovom Hamiltonijanu [14]:

$$\hat{H} = \sum_{\mathbf{i}, \mathbf{j}} \frac{J_{\mathbf{ij}}}{2} \mathbf{S}_{\mathbf{i}} \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{j}} \quad (1.2)$$

Ovde je $J_{\mathbf{ij}}$ integral izmene, dat sa $J_{\mathbf{ij}} = 4t_{\mathbf{ij}}^2/U$. Integral izmene je u homogenom kristalu funkcija samo razdaljine izmedju čvorova, $J_{\mathbf{ij}} = J(\mathbf{i} - \mathbf{j})$. Komponente vektora $\mathbf{S}_{\mathbf{i}}$ su spinski operatori $\hat{S}_{\mathbf{i}}^x$, $\hat{S}_{\mathbf{i}}^y$ i $\hat{S}_{\mathbf{i}}^z$, koji zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\hat{S}_{\mathbf{m}}^\alpha, \hat{S}_{\mathbf{n}}^\beta] = i\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} \delta_{\mathbf{mn}} \hat{S}_{\mathbf{m}}^\gamma, \quad \alpha, \beta, \gamma = x, y, z \quad (1.3)$$

$\varepsilon^{\alpha\beta\gamma}$ je simbol Levi-Čivita, definisan kao potpuno antisimetričan objekat sa $\varepsilon^{\alpha\beta\gamma} = +1$. Mi ćemo koristiti upravo Hajzenbergov model za opis magnetnih osobina pniktida gvoždja. Pritvatanjem Hajzenbergovog modela antiferomagnetizma mi odlazimo u drugu krajnost u odnosu

na LDA i slične metode - magnetne osobine pniktida opisujemo preko jako korelisanih i dobro lokalizovanih stepeni slobode, uz potpuno ignorisanje kolektivnih stepeni slobode. O primenljivosti ovakve aproksimacije na pniktide gvoždja ćemo moći više suditi kad dobijemo neke konkretne rezultate.

Uredjenje spinova zavisi od znaka integrala izmene J . Ako se ograničimo na interakciju medju najbližim susedima, slučaj $J < 0$ odgovara feromagnetnom, a slučaj $J > 0$ antiferomagnetnom uredjenju. Kod feromagnetnog uredjenja susedni spinovi teže da se orijentišu tako da pokazuju u istom smeru, a kod antiferomagnetnog uredjenja susedni spinovi teže da se orijentišu tako da pokazuju u suprotnim smerovima.

Da bismo mogli da opisujemo antiferomagnetno trakasto spinsko uredjenje kakvo se javlja kod pniktida gvoždja, moramo uzeti u obzir kako interakcije medju najbližim susedima (NN-nearest neighbors), tako i interakcije medju drugim najbližim susedima (NNN-next nearest neighbors). Potreban nam je Hamiltonijan oblika

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.4)$$

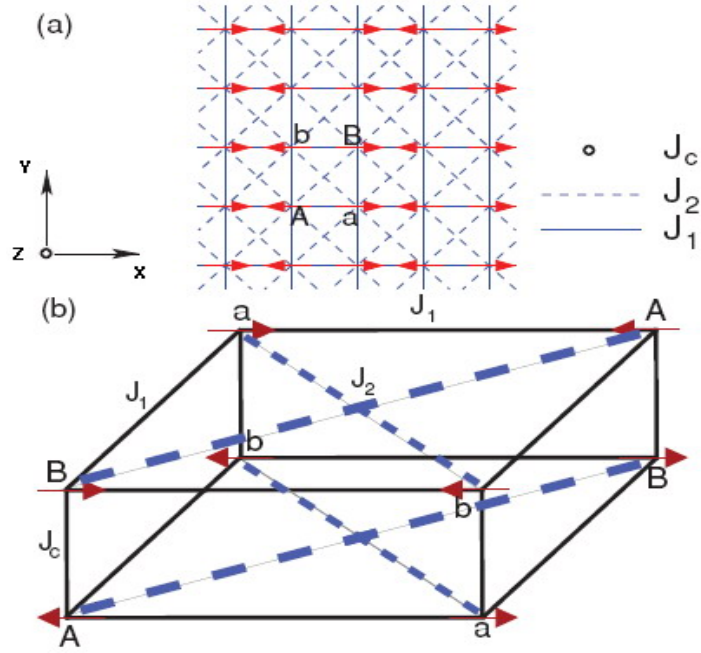
Suma $\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle$ je po najbližim susedima, a suma $\langle\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle\rangle$ je po sledećim najbližim susedima. U ovom Hamiltonijanu i J_1 i J_2 su antiferomagnetni, tj. i jedan i drugi integral izmene su veći od nule.

Pre nego nastavimo dalje, moramo istaći jednu bitnu razliku izmedju feromagnetnih i antiferomagnetnih materijala. Kod feromagnetnog uredjenja, u osnovnom stanju (na temperaturi $T = 0K$), svi spinovi pokazuju u jednom smeru. Drugim rečima, kod feromagnetnog uredjenja magnetizacija je maksimalna moguća u osnovnom stanju i tek sa podizanjem temperature spinovi počinju da se 'ljudaju' tj. javljaju se termalne fluktuacije koje smanjuju ukupnu magnetizaciju. Antiferomagnetnu rešetku možemo prikazati kao dve ili više isprepletenih feromagnetnih podrešetki. Možemo zamisliti stanje u kojem svi spinovi u datoj feromagnetnoj podrešetki pokazuju u istom smeru. Takvo stanje se naziva Nelovo stanje i ono se u prirodi ne ostvaruje čak ni na temperaturi apsolutne nule. U antiferomagnetnim sistemima se čak i na temperaturi apsolutne nule javljaju kvantne fluktuacije koje smanjuju ukupnu magnetizaciju. Obavljeni su računi u kojima je u Hamiltonijanu (1.4) zadržan samo J_1 član i ovi računi su pokazali da je osnovno stanje antiferomagneta blisko Nelovom stanju, ali Nelov poredak je redukovao kvantnim fluktuacijama [15].

Računi u kojima je razmatran pun Hamiltonijan (1.4) su pokazali da osnovno stanje sistema zavisi od odnosa koeficijenata J_2/J_1 . Generalno postoji saglasnost da trakasti spinski poredak može da postoji za $J_2/J_1 > 0.5$. Smanjivanjem odnosa J_2/J_1 na neku kritičnu vrednost trakasti poredak postaje nestabilan i zamenjuje ga osnovno stanje u kome nema dugodometnog uredjenja [16]. I u trakastom poretku kvantne fluktuacije smanjuju ukupnu magnetizaciju. Nas zanima trodimenziono uopštenje $J_1 - J_2$ modela. Drugim rečima, pored unutar-ravanskih interakcija, koje su dominantne, mi želimo da uzmemo u obzir i znatno slabije interakcije izmedju samih ravni. Ovo nas dovodi do $J_1 - J_2 - J_c$ modela:

$$\hat{H} = J_1 \sum_{\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_2 \sum_{\langle\langle \mathbf{i}, \mathbf{j} \rangle\rangle} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j + J_c \sum_{|\mathbf{i}, \mathbf{j}|} \mathbf{S}_i \cdot \mathbf{S}_j \quad (1.5)$$

Suma $|\mathbf{i}, \mathbf{j}|$ ide po najbližim susedima koji pripadaju različitim ravnima. Integral izmene J_c je bar za red veličine manji od J_1 i J_2 , zbog već pomenute slojevite strukture i znatno duže c ose



Slika 3: Jedinična magnetna rešetka: a) Unutar-ravanska struktura sa interakcijama J_1 i J_2 , J_c pokazuje u slici b) Puna trodimenziona struktura. Na slici su označene 4 feromagnetne podrešetke sa A, a, B i b .

kristalne rešetke. Istakli smo da ćemo kod pniktida gvoždja zanemariti strukturni fazni prelaz, tj. da smatramo da je elementarna ćelija tetragonalna. Šematski prikaz magnetne kristalne strukture dat je na Slici 3. Svaki čvor na slici predstavlja jon Fe^{2+} .

Dimenzije magnetne kristalne rešetke su $a \cdot a \cdot c$. Vrednosti parametara a i c za LaOFeAs smo već naveli – $a = 4.035 \cdot 10^{-10} \text{m}$ i $c = 8.740 \cdot 10^{-10} \text{m}$. Na Slici 3b) c osa je nacrtana znatno kraća od a ose da bi se lakše videli detalji u ravni. Konkretno vrednosti za ove parametre su zapravo nebitne jer će one svakako biti sadržane u definiciji Brillouenove zone (videti Prilog B). Tetragonalna struktura magnetne rešetke je uzeta u obzir kroz različite integrale izmene J_1 i J_c . Za sada samo smatramo da su vrednosti parametara J_1, J_2 i J_c takve da dopuštaju postojanje trakastog spinskog poretka. O konkretnijim vrednostima za ove parametre ćemo više reći kasnije, kad budemo diskutovali rezultate modela. Na Slici 3 su označene i 4 feromagnetne podrešetke koje formiraju jediničnu magnetnu rešetku. Kad bi postojanje Nelovog uredjenja bilo moguće u prirodi, u tom uredjenju bi svi spinovi u podrešetkama a i B pokazivali u jednom smeru, a spinovi u podrešetkama A i b bi pokazivali u suprotnom smeru. Mi ćemo smatrati da u Nelovom poretku svi spinovi u podrešetkama a i B pokazuju na gore, a u podrešetkama A i b na dole.

U modelnom Hamiltonijanu (1.5) želimo da predjemo sa operatora $\hat{S}_n^x, \hat{S}_n^y, \hat{S}_n^z$ na operatore koji podižu i spuštaju z projekciju spina na čvoru \mathbf{n} :

$$\hat{S}_n^+ = \hat{S}_n^x + i\hat{S}_n^y \quad (1.6)$$

$$\hat{S}_n^- = \hat{S}_n^x - i\hat{S}_n^y \quad (1.7)$$

Operatori \hat{S}_i^+ i \hat{S}_i^- su direktno povezani sa fizičkom slikom o spinovima koji se 'ljudaju' tj. čije se z projekcije podižu ili spuštaju. Operator \hat{S}^+ kreira pobudjenja u podreškama A i b , jer u Nelovom stanju svi spinovi u ovim podreškama pokazuju na dole (imaju minimalnu z projekciju). Sličnim argumentom dolazimo do zaključka da operator \hat{S}^- kreira pobudjenja u podreškama a i B , a anihilira pobudjenja u A i b . Komutacione relacije za \hat{S}_i^+ , \hat{S}_i^- i \hat{S}_i^z se lako nalaze iz komutacionih relacija (1.3):

$$[\hat{S}_m^+, \hat{S}_n^-] = 2\hat{S}_m^z \delta_{mn} \quad , \quad [\hat{S}_m^\pm, \hat{S}_n^z] = \mp \hat{S}_m^\pm \delta_{mn} \quad (1.8)$$

Pri radu sa operatorima \hat{S}_i^+ , \hat{S}_i^- i \hat{S}_i^z treba imati na umu i relacije

$$\prod_{r=-S}^S (\hat{S}_n^z - r) = 0 \quad (1.9)$$

$$(\hat{S}_n^+)^{2S+1} = (\hat{S}_n^-)^{2S+1} = 0 \quad (1.10)$$

Relacija (1.9) izražava činjenicu da z projekcija spina može da uzima samo vrednosti iz intervala od $-S$ do S . S je spinski kvantni broj koji karakteriše dati sistem i može uzimati samo cele ili polucele vrednosti. Zbog toga što z projekcija spina može da se kreće samo u intervalu vrednosti od $-S$ do S , operatori \hat{S}^+ i \hat{S}^- mogu da kreiraju/anihiliraju najviše $2S$ pobudjenja na datom čvoru kristalne rešetke, što je izraženo relacijom (1.10). Činjenica da spinski operatori mogu da kreiraju i anihiliraju samo konačan broj pobudjenja će praviti male probleme kasnije, kad budemo 'bozonizovali' Hamiltonijan.

Prelaz sa operatora \hat{S}_i^x i \hat{S}_i^y na operatore \hat{S}_i^+ i \hat{S}_i^- vršimo uz pomoć relacije

$$\mathbf{S}_n \cdot \mathbf{S}_m = \frac{1}{2}(\hat{S}_n^+ \hat{S}_m^- + \hat{S}_n^- \hat{S}_m^+) + \hat{S}_n^z \hat{S}_m^z \quad (1.11)$$

Spomenuli smo da u Nelovom stanju spinovi u podreškama a i B pokazuju na gore, a u podreškama A i b pokazuju na dole. Ovo praktično znači da imamo posla sa dve z ose (dve ose kvantizacije) – jednoj odgovara maksimalna vrednost projekcije spina, a drugoj minimalna vrednost projekcije. Da bi postupak bozonizacije (koji ćemo sprovesti kasnije u radu) bio korektan, mora postojati jedinstvena osa kvantizacije. Zato u podreškama A i b vršimo rotaciju oko x ose za 180° , što je ekvivalentno zamenama (rotacija se vrši u spinskom, ne u direktnom prostoru):

$$\hat{S}_n^-(A) \rightarrow \hat{S}_n^+(A) \quad , \quad \hat{S}_n^+(A) \rightarrow \hat{S}_n^-(A) \quad , \quad \hat{S}_n^z(A) \rightarrow -\hat{S}_n^z(A) \quad (1.12)$$

I slično za podrešetku b . Usled rotacije Nelovo stanje formalno izgleda kao osnovno stanje feromagneta. Nakon izvršene rotacije član u Hamiltonijanu $\mathbf{S}_n(a) \cdot \mathbf{S}_m(A)$ (na primer) postaje

$$\mathbf{S}_n(a) \cdot \mathbf{S}_m(A) = \frac{1}{2}(\hat{S}_n^+(a)\hat{S}_m^+(A) + h.c.) - \hat{S}_n^z(a)\hat{S}_m^z(A) \quad (1.13)$$

Sa $h.c.$ je označen izraz ermitski konjugovan izrazu koji prethodi. Nakon izvršene rotacije

Hamiltonijan (1.5), raspisan preko operatora \hat{S}_i^+ , \hat{S}_i^- i \hat{S}_i^z postaje:

$$\begin{aligned}
\hat{H} = & J_1 \sum_{\mathbf{n}, \delta_{Aa}^x} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^+(a) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^-(a)] - \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^z(a) \right) \\
& + J_1 \sum_{\mathbf{n}, \delta_{Bb}^x} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(B) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^+(b) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^-(b)] - \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(B) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^z(b) \right) \\
& + J_c \sum_{\mathbf{n}, \delta_{AB}^z} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^+(B) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^-(B)] - \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^z(B) \right) \\
& + J_c \sum_{\mathbf{n}, \delta_{ab}^z} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^+(a) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(b) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^-(a)] - \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(b) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^z(a) \right) \\
& + J_1^F \sum_{\mathbf{n}, \delta_{Ab}^y} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^-(b) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^+(b)] + \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^z(b) \right) \\
& + J_1^F \sum_{\mathbf{n}, \delta_{aB}^y} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^-(B) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^+(B)] + \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^z(B) \right) \\
& + J_2 \sum_{\mathbf{n}, \delta_2''} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^+(b) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^-(b)] - \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^z(b) \right) \\
& + J_2 \sum_{\mathbf{n}, \delta_2''} \left(\frac{1}{2} [\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^+(B) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^-(B)] - \hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^z(B) \right)
\end{aligned} \tag{1.14}$$

U Hamiltonijanu (1.14) oznake za vektore koji spajaju najbliže susede ($\delta_{Aa}^x, \delta_{Ab}^y, \dots$) su u skladu sa uvedenim koordinatnim sistemom, prikazanim na Slici 3a).

U modelnom Hamiltonijanu uvedena je oznaka J_1^F da bi se razlikovala interakcija medju najblizim susedima u ravni duž x ose, koja je antiferomagnetna, od iste interakcije duž y ose, koja je feromagnetna (videti Sliku 3a)). Integrali izmene J_1 i J_1^F bi trebalo da budu isti po intenzitetu, ali suprotnog znaka. O odnosu ova dva integrala izmene definitivnu odluku ćemo doneti kasnije, kad dobijemo zakon disperzije za magnone.

Treba takodje primetiti da članovi uz J_1^F izgledaju isto kako bi izgledali da rotacija u spinskom prostoru nije izvršena. Član $\mathbf{S}_{\mathbf{n}}(a) \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}(B)$ je nepromenjen jer rotacija nije vršena u podrešetkama a i B , dok je član $\mathbf{S}_{\mathbf{n}}(A) \cdot \mathbf{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}(b)$ nepromenjen jer se rotacije u podrešetkama A i b medjusobno 'ponišavaju'.

Glava 2

Spinski formalizam i RPA pristup

2.1 Jednačine kretanja i Grinove funkcije

Pošto imamo modelni Hamiltonijan (1.14), možemo početi sa proučavanjem dinamike koja sledi iz tog Hamiltonijana. Prvi korak je traženje Hajzenbergovih jednačina kretanja za operatore $\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A)$, $\hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a)$, $\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)$ i $\hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)$, koji kreiraju pobudjenja u podreškama A , a , b i B , respektivno. Uzimajući u obzir činjenicu da operatori koji deluju u različitim podreškama komutiraju, i uz pomoć komutacionih relacija (1.8), lako nalazimo Hajzenbergove jednačine kretanja:

$$\begin{aligned}
 i \frac{d\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A)}{dt} &= J_1 \sum_{\delta_{Aa}^x} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^- (a) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^z (a)) \\
 &+ J_c \sum_{\delta_{AB}^z} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^- (B) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^z (B)) \\
 &+ J_1^F \sum_{\delta_{Ab}^y} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^+ (b) - \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^z (b)) \\
 &+ J_2 \sum_{\delta_2''} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^- (B) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^z (B))
 \end{aligned} \tag{2.1}$$

$$\begin{aligned}
 i \frac{d\hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a)}{dt} &= -J_1 \sum_{\delta_{Aa}^x} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^+ (A) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^z (A)) \\
 &- J_c \sum_{\delta_{ab}^z} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^+ (b) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^z (b)) \\
 &- J_1^F \sum_{\delta_{aB}^y} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^- (B) - \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^z (B)) \\
 &- J_2 \sum_{\delta_2''} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^+ (b) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a) \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^z (b))
 \end{aligned} \tag{2.2}$$

$$\begin{aligned}
i\frac{d\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)}{dt} &= J_1 \sum_{\delta_{Bb}^x} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^-(B) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^z(B)) \\
&+ J_c \sum_{\delta_{ab}^z} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^-(a) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^z(a)) \\
&+ J_1^F \sum_{\delta_{Ab}^y} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^+(A) - \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^z(A)) \\
&+ J_2 \sum_{\delta_2''} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^-(a) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^z(a))
\end{aligned} \tag{2.3}$$

$$\begin{aligned}
i\frac{d\hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)}{dt} &= -J_1 \sum_{\delta_{Bb}^x} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^+(b) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^z(b)) \\
&- J_c \sum_{\delta_{AB}^z} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^+(A) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^z(A)) \\
&- J_1^F \sum_{\delta_{aB}^y} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^-(a) - \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^z(a)) \\
&- J_2 \sum_{\delta_2''} (\hat{S}_{\mathbf{n}}^z(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^+(A) + \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^z(A))
\end{aligned} \tag{2.4}$$

Pre nego što nastavimo dalje moramo nešto reći o metodu Grinovih funkcija. Metod Grinovih funkcija se zasniva na spektralnoj teoremi, koja daje očekivanu vrednost proizvoda dva operatora [17, 18, 19]:

$$\langle\langle \hat{B}|\hat{A} \rangle\rangle = \lim_{\epsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega \frac{\langle\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle\rangle_{\omega+i\epsilon} - \langle\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle\rangle_{\omega-i\epsilon}}{e^{\beta\omega} - 1}, \quad \beta = 1/T \tag{2.5}$$

Dokaz spektralne teoreme je dat u Prilogu C. $\langle\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle\rangle_{\omega}$ je Furije transform vreme-frekvencija Grinove funkcije $\langle\langle \hat{A}(t)|\hat{B}(t') \rangle\rangle$:

$$\langle\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{+\infty} d(t-t') \langle\langle \hat{A}(t)|\hat{B}(t') \rangle\rangle e^{i\omega(t-t')}, \quad \langle\langle \hat{A}(t)|\hat{B}(t') \rangle\rangle = \theta(t-t') \langle[\hat{A}(t), \hat{B}(t')]\rangle \tag{2.6}$$

Iz same definicije se lako izvodi jednačina kretanja za $\langle\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle\rangle_{\omega}$, koja glasi:

$$\omega \langle\langle \hat{A}|\hat{B} \rangle\rangle_{\omega} = \frac{i}{2\pi} \langle[\hat{A}, \hat{B}]\rangle + \langle\langle [\hat{A}, \hat{H}]|\hat{B} \rangle\rangle \tag{2.7}$$

U ovom radu će nas zanimati korelaciona funkcija oblika $\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^-\hat{S}_{\mathbf{n}}^+\rangle$, koju ćemo naći uz pomoć Grinove funkcije $\langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^+|\hat{S}_{\mathbf{n}}^- \rangle\rangle_{\omega}$. Iz relacije (2.7) i jednačina kretanja za operatore $\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A)$, $\hat{S}_{\mathbf{n}}^-(a)$, $\hat{S}_{\mathbf{n}}^+(b)$ i $\hat{S}_{\mathbf{n}}^-(B)$ možemo naći jednačine kretanja za Grinove funkcije koje sadrže ove operatore i neki

proizvoljan operator $\hat{R}_{\mathbf{m}}$, koji ćemo kasnije izabrati:

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi}\langle[\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}]\rangle \\
&+ J_1 \sum_{\delta_{Aa}^x} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{-(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_1 \sum_{\delta_{Aa}^x} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{z(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&+ J_c \sum_{\delta_{AB}^z} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{-(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_c \sum_{\delta_{AB}^z} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{z(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&+ J_1^F \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{+(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle - J_1^F \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{z(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&+ J_2 \sum_{\delta_2''} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{-(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_2 \sum_{\delta_2''} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{z(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle
\end{aligned} \tag{2.8}$$

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi}\langle[\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(a)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}]\rangle \\
&- J_1 \sum_{\delta_{Aa}^x} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{+(A)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle - J_1 \sum_{\delta_{Aa}^x} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{z(A)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&- J_c \sum_{\delta_{ab}^z} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^{+(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle - J_c \sum_{\delta_{ab}^z} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^{z(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&- J_1^F \sum_{\delta_{aB}^y} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^{-(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_1^F \sum_{\delta_{aB}^y} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^{z(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&- J_2 \sum_{\delta_2''} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{+(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle - J_2 \sum_{\delta_2''} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(a)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{z(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle
\end{aligned} \tag{2.9}$$

$$\begin{aligned}
\omega\langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi}\langle[\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(b)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}]\rangle \\
&+ J_1 \sum_{\delta_{Bb}^x} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^{-(B)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_1 \sum_{\delta_{Bb}^x} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^{z(b)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&+ J_c \sum_{\delta_{ab}^z} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^{-(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_c \sum_{\delta_{ab}^z} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{ab}^z}^{z(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&+ J_1^F \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{+(A)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle - J_1^F \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{z(A)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle \\
&+ J_2 \sum_{\delta_2''} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{-(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle + J_2 \sum_{\delta_2''} \langle\langle\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(b)}\hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{z(a)}|\hat{R}_{\mathbf{m}}\rangle\rangle
\end{aligned} \tag{2.10}$$

$$\begin{aligned}
\omega \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(B)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle &= \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(B)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}] \rangle \\
&- J_1 \sum_{\delta_{Bb}^x} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^{+(b)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle - J_1 \sum_{\delta_{Bb}^x} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Bb}^x}^{z(b)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle \\
&- J_c \sum_{\delta_{AB}^z} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle - J_c \sum_{\delta_{AB}^z} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{z(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle \\
&- J_1^F \sum_{\delta_{aB}^y} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^{-(a)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle + J_1^F \sum_{\delta_{aB}^y} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{aB}^y}^{z(a)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle \\
&- J_2 \sum_{\delta_2''} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle - J_2 \sum_{\delta_2''} \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{-(B)} \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{z(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle
\end{aligned} \tag{2.11}$$

Za sada je sve egzaktno, tj. u samom postupku do sad nismo napravili nijednu aproksimaciju. Međutim, vidimo da se u jednačinama kretanja za Grinove funkcije sa 2 operatora pojavljuju Grinove funkcije višeg reda, preciznije Grinove funkcije sa 3 operatora. Ovo je posledica specifičnog oblika komutatora spinskih operatora sa Hamiltonijanom. U jednačinama kretanja za Grinove funkcije sa 3 operatora pojavile bi se Grinove funkcije sa 4 operatora itd. Ovaj beskonačni lanac negde treba preseći, jednačine treba dekuplovati. Moramo posegnuti za nekom aproksimacijom da bismo mogli Grinove funkcije višeg reda izraziti preko Grinovih funkcija nižeg reda i tako zatvoriti sistem jednačina. U ovom radu ćemo iskoristiti jednu od najjednostavnijih metoda dekuplovanja, takozvano dekuplovanje Tjablikova.

2.2 Jednačine kretanja i zakon disperzije u RPA

Dekuplovanje Tjablikova, odnosno aproksimacija slučajnih faza (RPA) se sastoji u zanemaranju interakcije operatora \hat{S}^z koji deluje na jednom čvoru kristalne rešetke, sa operatorima \hat{S}^x i \hat{S}^y koji deluju na susednim čvorovima [17]. Primenjena na naš sistem jednačina za Grinove funkcije, ova aproksimacija nam omogućava da u Grinovim funkcijama sa 3 operatora izvučemo operator \hat{S}^z izvan Grinove funkcije:

$$\langle \langle \hat{S}_{\mathbf{i}}^z \hat{S}_{\mathbf{j}}^{\pm} | \hat{R}_{\mathbf{l}} \rangle \rangle \rightarrow \langle \hat{S}_{\mathbf{i}}^z \rangle \langle \langle \hat{S}_{\mathbf{j}}^{\pm} | \hat{R}_{\mathbf{l}} \rangle \rangle, \quad \mathbf{i} \neq \mathbf{j} \tag{2.12}$$

$\langle \hat{S}_{\mathbf{i}}^z \rangle$ nije ništa drugo do parametar uredjenosti, odnosno magnetizacija. Pretpostavljamo da je srednja vrednost magnetizacije na svakom čvoru ista i označićemo ovu srednju vrednost sa σ :

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{i}}^z \rangle = \sigma, \quad \text{za svako } \mathbf{i} \tag{2.13}$$

Postupci dekuplovanja Tjablikova i prelaska u impulsni prostor (koje sledi dekuplovanje) će detaljno biti pokazani na jednačini kretanja za $\langle \langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle \rangle$. Jednačine kretanja za ostale Grinove funkcije će samo biti navedene u konačnom obliku, nakon dekuplovanja i prelaska u impulsni prostor.

Usled aproksimacije slučajnih faza (2.12) jednačina kretanja za $\langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle$ postaje:

$$\begin{aligned}
\omega \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi} \langle[\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}]\rangle \\
&+ J_1 \sigma \sum_{\delta_{Aa}^x} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{-(a)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle + J_1 \overbrace{\sum_{\delta_{Aa}^x} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{z(a)} \rangle}^{2\sigma} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle \\
&+ J_c \sigma \sum_{\delta_{AB}^z} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{-(B)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle + J_c \overbrace{\sum_{\delta_{AB}^z} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{z(B)} \rangle}^{2\sigma} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle \\
&+ J_1^F \sigma \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{+(b)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle - J_1^F \overbrace{\sum_{\delta_{Ab}^y} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{z(b)} \rangle}^{2\sigma} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle \\
&+ J_2 \sigma \sum_{\delta_2''} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{-(B)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle + J_2 \overbrace{\sum_{\delta_2''} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{z(B)} \rangle}^{4\sigma} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle
\end{aligned}$$

Tačnost relacija

$$\sum_{\delta_{Aa}^x} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{z(a)} \rangle = \sum_{\delta_{AB}^z} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{z(B)} \rangle = \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{z(b)} \rangle = 2\sigma, \quad \sum_{\delta_2''} \langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{z(B)} \rangle = 4\sigma \quad (2.14)$$

se može videti na osnovu Slike 3b), ako pored i ispod (ili iznad) nacrtane jedinične magnetne rešetke zamislimo još identičnih magnetnih rešetki. Nakon sredjivanja dobijena jednačina kretanja za $\langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle$ poprima oblik:

$$\begin{aligned}
(\omega - \varepsilon) \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle &= \frac{i}{2\pi} \langle[\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}]\rangle \\
&+ J_1 \sigma \sum_{\delta_{Aa}^x} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Aa}^x}^{-(a)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle + J_c \sigma \sum_{\delta_{AB}^z} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{AB}^z}^{-(B)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle \\
&+ J_1^F \sigma \sum_{\delta_{Ab}^y} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_{Ab}^y}^{+(b)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle + J_2 \sigma \sum_{\delta_2''} \langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}+\delta_2''}^{-(B)} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle
\end{aligned} \quad (2.15)$$

U gornjoj jednačini je uvedena oznaka

$$\varepsilon = 2\sigma(J_1 + J_c - J_1^F + 2J_2) \quad (2.16)$$

U periodičnim strukturama kao što su kristali jednačine kretanja se mogu drastično uprostiti prelaskom u impulsni (recipročni) prostor pomoću Furije transformacije. Pretpostavljamo da je kristalna rešetka homogena. Razmotrimo proizvoljnu Grinovu funkciju sa 2 operatora, od kojih jedan operator deluje na čvoru \mathbf{n} a drugi na čvoru \mathbf{m} . Homogenost rešetke implicira da ova Grinova funkcija mora zavisiti samo od razdaljine izmedju čvorova, tj. od $\mathbf{n} - \mathbf{m}$, a ne i od toga koji su tačno čvorovi \mathbf{n} i \mathbf{m} u pitanju. Dokaz je dat u Prilogu C. Prema tome, Furije transform impuls-koordinata za sve Grinove funkcije sa kojima radimo mora imati oblik

$$\langle\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{\pm} | \hat{R}_{\mathbf{m}} \rangle\rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \langle\langle \hat{S}^{\pm} | \hat{R} \rangle\rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{n} - \mathbf{m})} \quad (2.17)$$

Ovde je N broj elementarnih ćelija, a vektor \mathbf{k} pripada I Brilluenuovoj zoni (videti Prilog B). Inverznu Furije transformaciju izvodimo po vektoru $\mathbf{n} - \mathbf{m} = \mathbf{r}$. Pogledajmo kako se član uz J_1 u jednačini (2.16) menja pri traženju inverzne Furije transformacije:

$$\begin{aligned} & J_1 \sigma \frac{1}{N} \sum_{\delta_{Aa}^x} \sum_{\mathbf{k}} \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{r} + \delta_{Aa}^x)} \xrightarrow{\sum_{\mathbf{r}} e^{-i\mathbf{q} \cdot \mathbf{r}}} J_1 \sigma \frac{1}{N} \sum_{\delta_{Aa}^x} \sum_{\mathbf{k}} \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\mathbf{k}} e^{i\mathbf{k} \cdot \delta_{Aa}^x} \overbrace{\sum_{\mathbf{r}} e^{i(\mathbf{k}-\mathbf{q}) \cdot \mathbf{r}}}^{N\delta_{\mathbf{k},\mathbf{q}}} = \\ & = J_1 \sigma \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\mathbf{q}} \sum_{\delta_{Aa}^x} e^{i\mathbf{q} \cdot \delta_{Aa}^x} = 2J_1 \sigma \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\mathbf{q}} \cos aq_x \end{aligned} \quad (2.18)$$

Primenom ovog postupka i na ostale članove jednačine (2.16), dobijamo jednačinu kretanja za Grinovu funkciju $\langle \langle \hat{S}^{+(A)} | \hat{R} \rangle \rangle$ u impulsnom prostoru (u jednačini je izvršena zamena $\mathbf{q} \rightarrow \mathbf{k}$):

$$(\omega - \varepsilon) \langle \langle \hat{S}^{+(A)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}} - J_x \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}} - J_y \langle \langle \hat{S}^{+(b)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}} - J_{2c} \langle \langle \hat{S}^{-(B)} | \hat{R} \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}} = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{S}^{+(A)}, \hat{R}] \rangle_{\omega, \mathbf{k}} \quad (2.19)$$

U gornjoj jednačini su uvedene oznake za geometrijske faktore:

$$J_x = 2\sigma J_1 \cos ak_x, \quad J_y = 2\sigma J_1^F \cos ak_y \quad (2.20)$$

$$J_{2c} = 2\sigma \left(2J_2 \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}) + J_c \cos ck_z \right), \quad \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}) = \cos ak_x \cos ak_y \quad (2.21)$$

Jednačine kretanja za ostale 3 Grinove funkcije nakon aproksimacije Tjablikova i prelaska u impulsni prostor postaju (nadalje ispuštamo indekse ω i \mathbf{k}):

$$J_x \langle \langle \hat{S}^{+(A)} | \hat{R} \rangle \rangle + (\omega + \varepsilon) \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle + J_{2c} \langle \langle \hat{S}^{+(b)} | \hat{R} \rangle \rangle + J_y \langle \langle \hat{S}^{-(B)} | \hat{R} \rangle \rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{S}^{-(a)}, \hat{R}] \rangle \quad (2.22)$$

$$-J_y \langle \langle \hat{S}^{+(A)} | \hat{R} \rangle \rangle - J_{2c} \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle + (\omega + \varepsilon) \langle \langle \hat{S}^{+(b)} | \hat{R} \rangle \rangle - J_x \langle \langle \hat{S}^{-(B)} | \hat{R} \rangle \rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{S}^{+(b)}, \hat{R}] \rangle \quad (2.23)$$

$$J_{2c} \langle \langle \hat{S}^{+(A)} | \hat{R} \rangle \rangle + J_y \langle \langle \hat{S}^{-(a)} | \hat{R} \rangle \rangle + J_x \langle \langle \hat{S}^{+(b)} | \hat{R} \rangle \rangle + (\omega + \varepsilon) \langle \langle \hat{S}^{-(B)} | \hat{R} \rangle \rangle = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{S}^{-(B)}, \hat{R}] \rangle \quad (2.24)$$

Jednačine (2.20) i (2.23)-(2.25) čine zatvoren sistem od 4 algebarske jednačine za Furije likove 4 Grinove funkcije. Determinanta sistema je

$$\Delta_4(\omega) = \begin{vmatrix} \omega - \varepsilon & -J_x & -J_y & -J_{2c} \\ J_x & \omega + \varepsilon & J_{2c} & J_y \\ -J_y & -J_{2c} & \omega - \varepsilon & -J_x \\ J_{2c} & J_y & J_x & \omega + \varepsilon \end{vmatrix} \quad (2.25)$$

Iz zahteva $\Delta_4(\omega) = 0$ dobijamo zakon disperzije magnona, odnosno vezu izmedju energije i talasnog vektora magnona. Ovo je zbog toga što polovi Grinovih funkcija daju energiju

elementarnih eksitacija u sistemu (videti Prilog C). Ispostavlja se da postoje 4 energetske grane. Eksplicitno raspisane, ove 4 grane su:

$$E_1 = 2\sigma \sqrt{J_1 + J_c - J_1^F + 2J_2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) + J_1 \cos ak_x - J_1^F \cos ak_y - J_c \cos ck_z} \times \\ \times \sqrt{J_1 + J_c - J_1^F + 2J_2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) - J_1 \cos ak_x - J_1^F \cos ak_y + J_c \cos ck_z} \quad (2.26)$$

$$E_2 = 2\sigma \sqrt{J_1 + J_c - J_1^F + 2J_2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) + J_1 \cos ak_x + J_1^F \cos ak_y + J_c \cos ck_z} \times \\ \times \sqrt{J_1 + J_c - J_1^F + 2J_2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) - J_1 \cos ak_x + J_1^F \cos ak_y - J_c \cos ck_z} \quad (2.27)$$

$$E_3 = -E_1 \quad (2.28)$$

$$E_4 = -E_2 \quad (2.29)$$

Sad treba da se odlučimo o odnosu integrala izmene J_1 i J_1^F . Već je napomenuto da bi korektan pristup zahtevao da ove dve veličine budu iste po intenzitetu a suprotne po znaku. Medjutim, kako bi pratili tok osnovne reference,²⁰ sa čijim rezultatima želimo da poredimo rezultate u ovom radu, odlučujemo se za izbor $J_1 = J_1^F$. Rezultati u RPA pristupu za $J_1 = -J_1^F$ su izloženi u Prilogu A. Sa izborom $J_1 = J_1^F$ dešavaju se neka skraćivanja u zakonu disperzije, pa tako energetska grana E_2 postaje

$$E_2 = 2\sigma \sqrt{J_c(1 + \cos ck_z) + 2J_2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) + J_1(\cos ak_x + \cos ak_y)} \times \\ \times \sqrt{J_c(1 - \cos ck_z) + 2J_2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) - J_1(\cos ak_x - \cos ak_y)} \quad (2.30)$$

Ovde smo naveli samo granu E_2 nakon izbora $J_1 = J_1^F$ jer ćemo nju numerički ispitivati dalje u radu, podrazumeva se da se i ostale grane menjaju pri ovom izboru za integrale izmene.

2.3 Magnetizacija u RPA

Pošto imamo zakon disperzije za magnone, ostalo je još da nadjemo magnetizaciju. Za proračun magnetizacije trebaće nam korelaciona funkcija oblika $\langle \hat{S}^- \hat{S}^+ \rangle$. Pretpostavljamo da je magnetizacija po apsolutnoj vrednosti ista za sve podrešetke, pa nam treba korelaciona funkcija samo za jednu podrešetku, na primer $\langle \hat{S}^-(A) \hat{S}^+(A) \rangle$. Za nalaženje ove korelacione funkcije moramo izračunati Grinovu funkciju $\langle \langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}}$. Navedenu Grinovu funkciju možemo naći iz sistema jednačina (2.20) i (2.23)-(2.25). Za operator \hat{R} biramo $\hat{R} = \hat{S}^-(A)$. Koristimo komutacione relacije za operatore \hat{S}^+ i \hat{S}^- , koje nam daju

$$\langle [\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}, \hat{R}_{\mathbf{m}}] \rangle = \langle [\hat{S}_{\mathbf{n}}^{+(A)}, \hat{S}_{\mathbf{m}}^{-(A)}] \rangle = 2\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^{z(A)} \rangle = 2\sigma \quad (2.31)$$

Uzimamo u obzir činjenicu da operatori koji deluju u različitim podrešetkama komutiraju, čime kompletiramo sistem jednačina za Grinove funkcije. Iz ovog sistema za Grinovu funkciju $\langle \langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}}$ dobijamo:

$$\langle \langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle \rangle_{\omega, \mathbf{k}} = \frac{i}{2\pi} \frac{P_3(E)}{\Delta_4(E)} \quad (2.32)$$

Ovde smo uveli smenu $\omega = E$ (ne zaboravimo da radimo u sistemu jedinica u kom je $\hbar = 1$). $P_3(E)$ je dato sa

$$P_3(E) = \begin{vmatrix} 2\sigma & -J_x & -J_y & -J_{2c} \\ 0 & E + \varepsilon & J_{2c} & J_y \\ 0 & -J_{2c} & E - \varepsilon & -J_x \\ 0 & J_y & J_x & E + \varepsilon \end{vmatrix} \quad (2.33)$$

$$P_3(E) = 2\sigma \left[(E + \varepsilon + J_y)(J_y - \varepsilon - E)(\varepsilon - E) + (E + \varepsilon)(J_x^2 + J_{2c}^2) - 2J_x J_y J_{2c} \right] \quad (2.34)$$

Jednačinu (2.33) za Grinovu funkciju možemo dalje rastaviti:

$$\langle\langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle\rangle_{\omega, \mathbf{k}} = \frac{i}{2\pi} \left[\frac{K(E_1)}{E - E_1} + \frac{K(-E_1)}{E + E_1} + \frac{K(E_2)}{E - E_1} + \frac{K(-E_2)}{E + E_2} \right] \quad (2.35)$$

Koeficijenti $K(E_i)$ su jednaki [22]:

$$K(E_i) = \frac{P_3(E_i)}{\left. \frac{d}{dE} \Delta_4(E) \right|_{E=E_i}} \quad (2.36)$$

Iz relacija

$$\Delta_4(E) = (E^2 - E_1^2)(E^2 - E_2^2) \longrightarrow \frac{d}{dE} \Delta_4(E) = 2E(2E^2 - E_1^2 - E_2^2) \quad (2.37)$$

dobijamo definitivne izraze za koeficijente $K(E_1)$:

$$K(E_i) = \frac{P_3(E_i)}{2E_i(2E_i^2 - E_1^2 - E_2^2)} \quad (2.38)$$

Za nalaženje korelacione funkcije $\langle \hat{S}_{\mathbf{m}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \rangle$ korišćimo se spektralnom teoremom (2.5). Pri tome, s obzirom da smo našli izraz za Grinovu funkciju $\langle\langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle\rangle$ u impulsnom prostoru, moramo se vratiti u direktni prostor pomoću Furije transformacije. Stoga pun izraz za korelacionu funkciju ima oblik

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{m}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \int_{-\infty}^{+\infty} d\omega I_{\hat{S}^-, \hat{S}^+}(\mathbf{k}, \omega) e^{-i\mathbf{k} \cdot (\mathbf{n} - \mathbf{m})} \quad (2.39)$$

Ovde je $I_{\hat{S}^-, \hat{S}^+}(\mathbf{k}, \omega)$ jednako:

$$I_{\hat{S}^-, \hat{S}^+}(\mathbf{k}, \omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{\langle\langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle\rangle_{\mathbf{k}, \omega + i\varepsilon} - \langle\langle \hat{S}^+(A) | \hat{S}^-(A) \rangle\rangle_{\mathbf{k}, \omega - i\varepsilon}}{e^{\beta\omega} - 1} \quad (2.40)$$

Uz pomoć Dirakovog simboličkog identiteta (\mathcal{P} je Košijeva glavna vrednost)[23]:

$$\frac{1}{x \pm i\varepsilon} = \mathcal{P} \frac{1}{x} \mp i\pi\delta(x), \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (2.41)$$

izraz za spektralnu intenzivnost svodimo na

$$I_{\hat{S}^-, \hat{S}^+} = 2\sigma \left[\frac{K(E_1)}{e^{E/T} - 1} \delta(E - E_1) + \frac{K(-E_1)}{e^{E/T} - 1} \delta(E + E_1) + \frac{K(E_2)}{e^{E/T} - 1} \delta(E - E_2) + \frac{K(-E_2)}{e^{E/T} - 1} \delta(E + E_2) \right]$$

(2.42)

Dobijeni izraz za spektralnu intenzivnost koristimo za računanje korelacione funkcije, pri čemu u korelacionoj funkciji uzimamo operatore koji deluju na istom čvoru kristalne rešetke ($\mathbf{n} = \mathbf{m}$). Time dobijamo

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \rangle = \frac{2\sigma}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{K(E_1)}{e^{E_1/T} - 1} + \frac{K(-E_1)}{e^{-E_1/T} - 1} + \frac{K(E_2)}{e^{E_2/T} - 1} + \frac{K(-E_2)}{e^{-E_2/T} - 1} \right] \quad (2.43)$$

Korelaciona funkcija može da se napiše u obliku

$$\langle \hat{S}_{\mathbf{n}}^-(A) \hat{S}_{\mathbf{n}}^+(A) \rangle = 2\sigma P_S(T) \quad (2.44)$$

$$P_S(T) = \frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{K(E_1) - K(-E_1)}{e^{E_1/T} - 1} + \frac{K(E_2) - K(-E_2)}{e^{E_2/T} - 1} - K(-E_1) - K(-E_2) \right] \quad (2.45)$$

Za dobijanje izraza (2.46) od izraza u (2.44) korišćen je identitet $\frac{1}{e^{-x} - 1} = -1 - \frac{1}{e^x - 1}$. Na temperaturi apsolutne nule P_S postaje

$$P_S(0) = -\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} [K(-E_1) + K(-E_2)] \quad (2.46)$$

Na temperaturi apsolutne nule nema termičkih fluktuacija, pa $P_S(0)$ predstavlja kvantne fluktuacije, karakteristične za antiferomagnetne sisteme. Direktno uticaj kvantnih fluktuacija na smanjenje magnetizacije ćemo videti uskoro, kad nadjemo izraz za magnetizaciju. Za nalaženje magnetizacije za proizvoljan spin S koristimo Kalenovu formulu [24]:

$$\sigma = \frac{(S - P_S)(1 + P_S)^{2S+1} + (1 + S + P_S)P_S^{2S+1}}{(1 + P_S)^{2S+1} - P_S^{2S+1}} \quad (2.47)$$

P_S je upravo funkcija koja se pojavljuje u jednačini (2.45). U ovom radu zanimali nas samo spin $1/2$ i spin 1 . Za ove spinove Kalenov izraz za magnetizaciju postaje

$$\sigma = \frac{1}{2} \frac{1}{1 + 2P_{1/2}}, \quad S = \frac{1}{2} \quad (2.48)$$

$$\sigma = \frac{1 + 2P_1}{1 + 3P_1 + 3P_1^2}, \quad S = 1 \quad (2.49)$$

Za nalaženje definitivnog izraza za $P_S(T)$ trebaju nam koeficijenti $A(E_i)$. Nakon sredjivanja, na osnovu relacije (2.39) dobijamo konačno i ove koeficijente:

$$K(E_1) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \frac{\varepsilon - J_y}{E_1} \quad (2.50)$$

$$K(-E_1) = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \frac{\varepsilon - J_y}{E_1} \quad (2.51)$$

$$K(E_2) = \frac{1}{4} + \frac{1}{4} \frac{\varepsilon + J_y}{E_2} \quad (2.52)$$

$$K(-E_2) = \frac{1}{4} - \frac{1}{4} \frac{\varepsilon + J_y}{E_1} \quad (2.53)$$

Ubacivanjem dobijenih koeficijenata u izraz za $P_S(T)$ nalazimo krajnji oblik ove funkcije za proizvoljnu temperaturu

$$P_S(T) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left[\frac{\varepsilon - J_y}{E_1} \coth \frac{E_1}{2T} + \frac{\varepsilon + J_y}{E_2} \coth \frac{E_2}{2T} \right] - \frac{1}{2} \quad (2.54)$$

Nas zanima samo magnetizacija na temperaturi apsolutne nule. Koristeći identitet $\lim_{x \rightarrow \infty} \coth x = 1$ lako nalazimo $P_S(0)$:

$$P_S(0) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{\varepsilon - J_y}{E_1} + \frac{\varepsilon + J_y}{E_2} \right) - \frac{1}{2} \quad (2.55)$$

Sa dobijenim izrazom za $P_S(0)$ i uz pomoć Kalenovih relacija (2.49) i (2.50) možemo naći magnetizaciju na temperaturi apsolutne nule za spinove $S = 1/2$ i $S = 1$. Pre toga ćemo samo još malo transformisati funkciju $P_S(0)$. Naime, svi članovi unutar sume u $P_S(0)$ zavise (između ostalog) od σ i J_2 . Pogodno je da iz svih ovih članova izvučemo proizvod $2\sigma \cdot J_2$, što nam nakon skraćivanja izvučenih proizvoda ostavlja

$$P_S(0) = \frac{1}{4N} \sum_{\mathbf{k}} \left(\frac{Y + 2 - X \cos ak_y}{\sqrt{\dots_1}} + \frac{Y + 2 + X \cos ak_y}{\sqrt{\dots_2}} \right) - \frac{1}{2} \quad (2.56)$$

Ovde su uvedene oznake

$$X = J_1/J_2, \quad Y = J_c/J_2 \quad (2.57)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\dots_1} &= \sqrt{Y(1 - \cos ck_z) + X(\cos ak_x - \cos ak_y) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \times \\ &\times \sqrt{Y(1 + \cos ck_z) - X(\cos ak_x + \cos ak_y) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \end{aligned} \quad (2.58)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\dots_2} &= \sqrt{Y(1 - \cos ck_z) - X(\cos ak_x - \cos ak_y) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \times \\ &\times \sqrt{Y(1 + \cos ck_z) + X(\cos ak_x + \cos ak_y) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \end{aligned} \quad (2.59)$$

Na ovaj način smo dobili $P_S(0)$ (a samim tim i magnetizaciju) kao funkciju takozvanih parametara frustracije $X = J_1/J_2$ i $Y = J_c/J_2$. Poslednji korak koji moramo obaviti pre raspisivanja konačnih izraza za magnetizaciju je prelazak sa sume $\sum_{\mathbf{k}}$ na integral po I Brilluonovoj zoni.

$$\frac{1}{N} \sum_{\mathbf{k}} (\dots) \longrightarrow \frac{4}{\pi^3} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi} dy \int_0^{\pi/2} dz (\dots) \quad (2.60)$$

Uveli smo oznake

$$ak_x = x, \quad ak_y = y, \quad ck_z = z \quad (2.61)$$

Prelaz sa sume na integral po I Brilluonovoj zoni je objašnjenje u Prilogu B. Konačno, koristeći Kalenov izraz dobijamo magnetizacije za spin 1/2 i spin 1:

$$\sigma(0) = I^{-1} , S = 1/2 \quad (2.62)$$

$$\sigma(0) = \frac{2I}{1 + \frac{3}{4}I^2} , S = 1 \quad (2.63)$$

$$I = \frac{4}{\pi^3} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi} dy \int_0^{\pi/2} dz \left(\frac{Y + 2 - X \cos y}{\sqrt{\dots_1}} + \frac{Y + 2 + X \cos y}{\sqrt{\dots_2}} \right) \quad (2.64)$$

Razumljivo je da integral I ne možemo naći analitičkim putem. Zato ćemo se za proučavanje magnetizacije i disperzije poslužiti numeričkim metodama uz pomoć programskog pameta *Mathematica* 7.0. Medjutim, pre nego što krenemo na numeričku analizu upotrebićemo još jedan metod za nalaženje magnetizacije i disperzije iz modelnog Hamiltonijana (1.14).

Glava 3

Bozonizacija i LSW pristup

3.1 Reprezentacija Dajson-Maljejeva

Spinski formalizam i RPA metod su vrlo moćni, ali imaju i neke nezanemarljive nedostatke. Kao prvo, spinski operatori imaju relativno komplikovanu kinematiku, odnosno relativno komplikovane komutacione relacije (1.3) i (1.8). Takodje, Furije transformi spinskih operatora \hat{S}^+ , \hat{S}^- i \hat{S}^z ne zadovoljavaju komutacione relacije (1.8). Zato smo pri prelasku u impulsni prostor definisali Furije transform za Grinovu funkciju kao celinu (jednačina (2.18)), a ne za svaki spinski operator posebno. Konačno, pri aproksimaciji Tjablikova pravi se greška čiju je relativnu veličinu gotovo nemoguće proceniti. Zato je čak i pri dostupnosti eksperimentalnih podataka poželjno jedan problem 'pročešljati' na više od jednog načina, kako bi se mogli uporediti rezultati iz različitih pristupa.

Većina alternativa za spinski formalizam se oslanja na zamenjivanje spinskih operatora Boze operatorima. Boze operatori imaju znatno jednostavnije komutacione relacije, i što je takodje vrlo bitno, Furije transformacija je za Boze operatore kanonička – Furije transformi Boze operatora zadovoljavaju iste komutacione relacije kao i sami Boze operatori. Postoji više metoda za 'bozonizaciju' Hamiltonijana koji sadrži spinske operatore, a mi ćemo se poslužiti reprezentacijom Dajson-Maljejeva [25, 26]. U ovoj reprezentaciji spinski operatori koji deluju u podreškama a i B imaju oblik:

$$\hat{S}_i^{z(a)} = S - \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \qquad \hat{S}_j^{z(B)} = S - \hat{B}_j^\dagger \hat{B}_j \qquad (3.1)$$

$$\hat{S}_i^{+(a)} = \sqrt{2S} \hat{a}_i \qquad \hat{S}_j^{+(B)} = \sqrt{2S} \hat{B}_j \qquad (3.2)$$

$$\hat{S}_i^{-(a)} = \sqrt{2S} (\hat{a}_i^\dagger - \frac{1}{2S} \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i) \qquad \hat{S}_j^{-(B)} = \sqrt{2S} (\hat{B}_j^\dagger - \frac{1}{2S} \hat{B}_j^\dagger \hat{B}_j^\dagger \hat{B}_j) \qquad (3.3)$$

U ovoj Glavi ćemo vektore čvorova rešetke označavati sa italic fontom (i) umesto sa bold fontom (\mathbf{i}), ali treba uvek imati na umu da su u pitanju vektorske a ne skalarne veličine. Operatori \hat{a}_i^\dagger i \hat{a}_i su respektivno kreacioni i anihilacioni Boze operatori koji zadovoljavaju komutacione relacije

$$[\hat{a}_i, \hat{a}_j] = [\hat{a}_i^\dagger, \hat{a}_j^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_i, \hat{a}_j^\dagger] = \delta_{ij} \qquad (3.4)$$

Iste komutacione relacije važe i za operatore koji deluju u podrešetci B , kao i u podreškama A i b . Pomoću komutacionih relacija (3.4) je vrlo lako pokazati da operatori \hat{S}_i^+ , \hat{S}_i^- i \hat{S}_z^+

definisani jednačinama (3.1)-(3.3) zadovoljavaju komutacione relacije (1.8). Za podrešetke A i b reprezentacija Dajson-Maljejeva ima oblik

$$\hat{S}_i^{z(b)} = S - \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \qquad \hat{S}_j^{z(A)} = S - \hat{A}_j^\dagger \hat{A}_j \qquad (3.5)$$

$$\hat{S}_i^{-(b)} = \sqrt{2S} \hat{b}_i^\dagger \qquad \hat{S}_j^{-(A)} = \sqrt{2S} \hat{A}_j^\dagger \qquad (3.6)$$

$$\hat{S}_i^{+(b)} = \sqrt{2S} (\hat{b}_i - \frac{1}{2S} \hat{b}_i^\dagger \hat{b}_i \hat{b}_i) \qquad \hat{S}_j^{+(A)} = \sqrt{2S} (\hat{A}_j - \frac{1}{2S} \hat{A}_j^\dagger \hat{A}_j \hat{A}_j) \qquad (3.7)$$

Najveći nedostatak svih metoda bozonizacije spinskih operatora leži u činjenici da spinski operatori \hat{S}^+ i \hat{S}^- mogu da kreiraju/anihiliraju samo konačan broj pobudjenja na datom čvoru rešetke, dok Boze operatori mogu da kreiraju/anihiliraju proizvoljan broj pobudjenja od 0 do ∞ . Stanja sa $\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle > 2S$, iako matematički dozvoljena, nisu fizička stanja. Očekujemo da Boze operatori budu dobra 'zamenja' spinskim operatorima dokle god važi $\langle \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i \rangle \leq 2S$. To znači da su postupci bozonizacije utoliko tačniji što je temperatura niža (broj eksitacija po čvoru je manji) i što je spin sistema veći. Nas zanimaju magnetizacija i disperzija na temperaturi apsolutne nule, kad postoje samo kvantne fluktuacije, pa očekujemo da Boze operatori budu korektna zamena spinskim operatorima.

Prednost reprezentacije Dajson-Maljejeva u odnosu na slične postupke bozonizacije (poput reprezentacije Holštajn-Primakova) je u tome što su spinski operatori predstavljeni pomoću konačnog 'reda' po Boze operatorima. Sa druge strane, očigledni nedostatak ove reprezentacije je činjenica da \hat{S}^+ i \hat{S}^- više nisu ermitski konjugovani jedan drugom, pa ni Hamiltonijan više nije ermitski operator. Tačnije, pri korišćenju reprezentacije Dajson-Maljejeva Hamiltonijan se dobija u obliku

$$\hat{H} = \hat{H}_0 + \hat{H}_2 + \hat{H}_4 \qquad (3.8)$$

Ovde je \hat{H}_0 konstantni član, \hat{H}_2 sadrži različite proizvode po 2 Boze operatora, dok \hat{H}_4 sadrži proizvode po 4 Boze operatora. Upravo \hat{H}_4 narušava ermitsku strukturu Hamiltonijana. Međutim, u ovom radu neermitska priroda \hat{H}_4 nas neće brinuti jer ćemo ovaj član u okviru tzv. Blohove aproksimacije zanemariti. Zadržavanjem konstantnog dela Hamiltonijana i člana kvadratnog po Boze operatorima mi ignorišemo procese rasejanja spinskih talasa, pa se ova aproksimacija često naziva i linear spin wave (LSW) aproksimacija. U Blohovoj aproksimaciji, nakon postupka bozonizacije, Hamiltonijan (1.5) postaje:

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_0 \\ & + S J_1 \sum_{i, \delta_x} (\hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i + \hat{a}_{i+\delta_x}^\dagger \hat{a}_{i+\delta_x} + \hat{A}_i \hat{a}_{i+\delta_x} + \hat{A}_i^\dagger \hat{a}_{i+\delta_x}^\dagger + \hat{B}_i^\dagger \hat{B}_i + \hat{b}_{i+\delta_x}^\dagger \hat{b}_{i+\delta_x} + \hat{B}_i \hat{b}_{i+\delta_x} + \hat{B}_i^\dagger \hat{b}_{i+\delta_x}^\dagger) \\ & - S J_1^F \sum_{i, \delta_y} (\hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i + \hat{b}_{i+\delta_y}^\dagger \hat{b}_{i+\delta_y} - \hat{A}_i \hat{b}_{i+\delta_y}^\dagger - \hat{A}_i^\dagger \hat{b}_{i+\delta_y} + \hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{B}_{i+\delta_y}^\dagger \hat{B}_{i+\delta_y} - \hat{a}_i \hat{B}_{i+\delta_y}^\dagger - \hat{a}_i^\dagger \hat{B}_{i+\delta_y}) \\ & + S J_c \sum_{i, \delta_z} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{b}_{i+\delta_z}^\dagger \hat{b}_{i+\delta_z} + \hat{a}_i \hat{b}_{i+\delta_z} + \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_{i+\delta_z}^\dagger + \hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i + \hat{B}_{i+\delta_z}^\dagger \hat{B}_{i+\delta_z} + \hat{A}_i \hat{B}_{i+\delta_z} + \hat{A}_i^\dagger \hat{B}_{i+\delta_z}^\dagger) \\ & + S J_2 \sum_{i, \delta_2} (\hat{a}_i^\dagger \hat{a}_i + \hat{b}_{i+\delta_2}^\dagger \hat{b}_{i+\delta_2} + \hat{a}_i \hat{b}_{i+\delta_2} + \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_{i+\delta_2}^\dagger + \hat{A}_i^\dagger \hat{A}_i + \hat{B}_{i+\delta_2}^\dagger \hat{B}_{i+\delta_2} + \hat{A}_i \hat{B}_{i+\delta_2} + \hat{a}_i^\dagger \hat{b}_{i+\delta_2}^\dagger) \end{aligned} \qquad (3.9)$$

E_0 je konstanta koja nema nikakav uticaj na dinamiku sistema jer će svakako nestati pri traženju jednačina kretanja.

3.2 Zakon disperzije i magnetizacija u Blohovoj aproksimaciji

Kao što je već istaknuto u prethodnoj Glavi, u periodičnim strukturama jednačine kretanja se mogu drastično uprostiti prelaskom u impulsni prostor. Obzirom da je Furije transformacija za Boze operatore kanonička, možemo definisati Furije transform za svaki operator posebno:

$$\hat{a}_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_k e^{+ik \cdot n} \quad \hat{a}_n^\dagger = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_k \hat{a}_k^\dagger e^{-ik \cdot n} \quad (3.10)$$

I slično za operatore koji deluju u drugim podrešetkama. Pogledajmo kako se menjaju neki karakteristični članovi u Hamiltonijanu pri Furije transformaciji:

$$\sum_{n, \delta_y} \hat{A}_n^\dagger \hat{A}_n = \sum_{\delta_y} \frac{1}{N} \sum_{k, q} \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_q \underbrace{\sum_n e^{i(q-k)n}}_{N\delta_{q,k}} = \sum_k \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k \sum_{\delta_y} 1 = 2 \sum_k \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k \quad (3.11)$$

$$\sum_{n, \delta_y} \hat{A}_n \hat{b}_{n+\delta_y}^\dagger = \sum_{\delta_y} \frac{1}{N} \sum_{k, q} \hat{A}_k \hat{b}_q^\dagger \underbrace{\sum_n e^{i(k-q)n}}_{N\delta_{k,q}} e^{-iq \cdot \delta_y} = \sum_k \hat{A}_k \hat{b}_k^\dagger \sum_{\delta_y} e^{-ik \cdot \delta_y} = 2 \sum_k \hat{A}_k \hat{b}_k^\dagger \cos ak_y \quad (3.12)$$

$$\sum_{n, \delta_y} \hat{b}_{n+\delta_y}^\dagger \hat{b}_{n+\delta_y} = \sum_n \frac{1}{N} \sum_{k, q} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_q \sum_{\delta_y} e^{i(q-k)(n+\delta_y)} = \quad (3.13)$$

$$\frac{1}{N} \sum_{k, q} \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_q \left(\underbrace{\sum_n e^{i(q-k)(n+ae_y)}}_{N\delta_{k,q}} + \underbrace{\sum_n e^{i(q-k)(n-ae_y)}}_{N\delta_{k,q}} \right) = 2 \sum_k \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k \quad (3.14)$$

Konačno, ceo Hamiltonijan (3.9) u impulsnom prostoru ima oblik

$$\begin{aligned} \hat{H} = & E_0 \\ & + 2SJ_1 \sum_k \left(\hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \cos ak_x \left(\hat{A}_k \hat{a}_{-k} + \hat{A}_k^\dagger \hat{a}_{-k}^\dagger + \hat{B}_k \hat{b}_{-k} + \hat{B}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger \right) \right) \\ & - 2SJ_1^F \sum_k \left(\hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k - \cos ak_y \left(\hat{A}_k \hat{b}_k^\dagger + \hat{A}_k^\dagger \hat{b}_k + \hat{a}_k \hat{B}_k^\dagger + \hat{a}_k^\dagger \hat{B}_k \right) \right) \\ & + 4SJ_2 \sum_k \left(\hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \cos ak_x \cos ak_y \left(\hat{A}_k \hat{B}_{-k} + \hat{A}_k^\dagger \hat{B}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{b}_{-k} + \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger \right) \right) \\ & + 2SJ_c \sum_k \left(\hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k + \hat{a}_k^\dagger \hat{a}_k + \hat{B}_k^\dagger \hat{B}_k + \hat{b}_k^\dagger \hat{b}_k + \cos ck_z \left(\hat{A}_k \hat{B}_{-k} + \hat{A}_k^\dagger \hat{B}_{-k}^\dagger + \hat{a}_k \hat{b}_{-k} + \hat{a}_k^\dagger \hat{b}_{-k}^\dagger \right) \right) \end{aligned} \quad (3.15)$$

Komutacione relacije za operatore \hat{a}_k^\dagger i \hat{a}_k su iste kao komutacione relacije (3.4):

$$[\hat{a}_k, \hat{a}_q] = [\hat{a}_k^\dagger, \hat{a}_q^\dagger] = 0, \quad [\hat{a}_k, \hat{a}_q^\dagger] = \delta_{kq} \quad (3.16)$$

Iste komutacione relacije važe za operatore koji deluju u ostalim podrešetkama. Jednačine kretanja za operatore $\hat{A}_k, \hat{a}_{-k}^\dagger, \hat{b}_k$ i \hat{B}_{-k}^\dagger , koji kreiraju pobudjenja u podrešetkama A, a, b i B respektivno, glase:

$$i \frac{d\hat{A}_k}{dt} = \varepsilon \hat{A}_k + J_x \hat{a}_{-k}^\dagger + J_y \hat{b}_k + J_{2c} \hat{B}_{-k}^\dagger \quad (3.17)$$

$$i \frac{d\hat{a}_{-k}^\dagger}{dt} = -J_x \hat{A}_k - \varepsilon \hat{a}_{-k}^\dagger - J_{2c} \hat{b}_k - J_y \hat{B}_{-k}^\dagger \quad (3.18)$$

$$i \frac{d\hat{b}_k}{dt} = J_y \hat{A}_k + J_{2c} \hat{a}_{-k}^\dagger + \varepsilon \hat{b}_k + J_x \hat{B}_{-k}^\dagger \quad (3.19)$$

$$i \frac{d\hat{B}_{-k}^\dagger}{dt} = -J_{2c} \hat{A}_k - J_y \hat{a}_{-k}^\dagger - J_x \hat{b}_k - \varepsilon \hat{B}_{-k}^\dagger \quad (3.20)$$

J_x, J_y, J_{2c} su isti geometrijski faktori koje smo sreli u prethodnoj Glavi:

$$J_x = 2\sigma J_1 \cos ak_x, \quad J_y = 2\sigma J_1^F \cos ak_y \quad (3.21)$$

$$J_{2c} = 2\sigma \left(2J_2 \gamma_2(\mathbf{k}_{||}) + J_c \cos ck_z \right), \quad \gamma_2(\mathbf{k}_{||}) = \cos ak_x \cos ak_y \quad (3.22)$$

Faktor ε smo takodje sreli ranije i on iznosi

$$\varepsilon = 2\sigma(J_1 + J_c - J_1^F + 2J_2) \quad (3.23)$$

Kao i u spinskom formalizmu, iz jednačina kretanja za operatore $\hat{A}_k, \hat{a}_{-k}^\dagger, \hat{b}_k$ i \hat{B}_{-k}^\dagger možemo konstruisati jednačine kretanja za Grinove funkcije koje sadrže ove operatore i neki proizvoljan operator \hat{R} :

$$(\omega - \varepsilon) \langle \langle \hat{A}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega - J_x \langle \langle \hat{a}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega - J_y \langle \langle \hat{b}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega - J_{2c} \langle \langle \hat{B}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{A}_k, \hat{R}] \rangle \quad (3.24)$$

$$J_x \langle \langle \hat{A}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega + (\omega + \varepsilon) \langle \langle \hat{a}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega + J_y \langle \langle \hat{b}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega - J_{2c} \langle \langle \hat{B}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{a}_{-k}^\dagger, \hat{R}] \rangle \quad (3.25)$$

$$-J_y \langle \langle \hat{A}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega - J_{2c} \langle \langle \hat{a}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega + (\omega - \varepsilon) \langle \langle \hat{b}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega - J_x \langle \langle \hat{B}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{b}_k, \hat{R}] \rangle \quad (3.26)$$

$$J_{2c} \langle \langle \hat{A}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega + J_y \langle \langle \hat{a}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega + J_x \langle \langle \hat{b}_k | \hat{R} \rangle \rangle_\omega + (\omega + \varepsilon) \langle \langle \hat{B}_{-k}^\dagger | \hat{R} \rangle \rangle_\omega = \frac{i}{2\pi} \langle [\hat{B}_{-k}^\dagger, \hat{R}] \rangle \quad (3.27)$$

Koeficijenti koji stoje uz nepoznate promenljive u gornjem sistemu jednačina su identični koeficijentima koji se javljaju u jednačinama (2.20) i (2.23)-(2.25), uz jedinu razliku što u LSW pristupu umesto magnetizacije σ figuriše spinski kvantni broj S . Ovo praktično znači da je zakon disperzije magnona u LSW teoriji isti kao u RPA, uz zamenu $\sigma \rightarrow S$. Stoga možemo samo da prepisemo izraze za 4 energetske grane koje smo dobili ranije, i izvršimo gorepomenutu zamenu, što nam daje:

$$E_1 = 2S \sqrt{J_c(1 + \cos ck_z) + 2J_2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{||}))} - J_1(\cos ak_x + \cos ak_y) \times \\ \times \sqrt{J_c(1 - \cos ck_z) + 2J_2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{||}))} + J_1(\cos ak_x - \cos ak_y) \quad (3.28)$$

$$E_2 = 2S \sqrt{J_c(1 + \cos ck_z) + 2J_2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) + J_1(\cos ak_x + \cos ak_y)} \times \sqrt{J_c(1 - \cos ck_z) + 2J_2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{||})) - J_1(\cos ak_x - \cos ak_y)} \quad (3.29)$$

$$E_3 = -E_1 \quad (3.30)$$

$$E_4 = -E_2 \quad (3.31)$$

Iako to u našem radu nema nikakav značaj jer ćemo sve analize praviti za fiksiranu vrednost temperature, treba primetiti da u LSW teoriji zakon disperzije ne zavisi od temperature, dok u RPA pristupu zavisnost od temperature ulazi u disperziju preko magnetizacije σ .

Ostalo je još da nadujemo magnetizaciju u LSW pristupu. Iz reprezentacije Dajson-Maljejeva vidimo kako možemo naći magnetizaciju tj. očekivanu vrednost operatora \hat{S}^z . Opet pretpostavljamo da magnetizacija u srednjem ima iste vrednosti u sve 4 podrešetke, pa nam treba magnetizacija samo jedne podrešetke, na primer podrešetke A :

$$\langle \hat{S}_n^z(A) \rangle = S - \langle \hat{A}_n^\dagger \hat{A}_n \rangle = S - \frac{1}{N} \sum_k \langle \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k \rangle \quad (3.32)$$

Za nalaženje korelacione funkcije $\langle \hat{A}_k^\dagger \hat{A}_k \rangle$ koristimo se spektralnom teoremom (2.5). Potrebna nam je Grinova funkcija $\langle \langle \hat{A}_k | \hat{A}_k^\dagger \rangle \rangle_\omega$, koju računamo iz sistema jednačina (3.24)-(3.27). Izborom operatora $\hat{R} = \hat{A}_k^\dagger$ i uz komutacione relacije za Boze operatore dobijamo

$$\langle [\hat{A}_k, \hat{R}] \rangle = \langle [\hat{A}_k, \hat{A}_k^\dagger] \rangle = 1 \quad (3.33)$$

Ostali komutatori u sistemu jednačina (3.24)-(3.27) su 0. Odatle dobijamo potrebnu Grinovu funkciju:

$$\langle \langle \hat{A}_k | \hat{A}_k^\dagger \rangle \rangle_\omega = \frac{i}{2\pi} \frac{P_{3B}(E)}{\Delta_4^B(E)} \quad (3.34)$$

$$P_{3B}(E) = \begin{vmatrix} 1 & -J_x & -J_y & -J_{2c} \\ 0 & E + \varepsilon & J_{2c} & J_y \\ 0 & -J_{2c} & E - \varepsilon & -J_x \\ 0 & J_y & J_x & E + \varepsilon \end{vmatrix} \quad (3.35)$$

$$P_{3B}(E) = \left[(E + \varepsilon + J_y)(J_y - \varepsilon - E)(\varepsilon - E) + (E + \varepsilon)(J_x^2 + J_{2c}^2) - 2J_x J_y J_{2c} \right] \quad (3.36)$$

Detalji daljeg računa će biti izostavljeni jer se u računanju korelacione funkcije pojavljuju identični izrazi i postupci koje smo sreli u RPA pristupu. Navodimo samo krajnji rezultat, koji posle prelaska sa sume na integral po I Brilluonovoj zoni glasi:

$$\sigma_S(0) = S + \frac{1}{2} - I' \quad (3.37)$$

Ovde se integral I' razlikuje od integrala I kojeg smo sreli u prethodnoj Glavi samo po numeričkom faktoru ispred samog znaka integracije:

$$I = \frac{1}{\pi^3} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^\pi dy \int_0^{\pi/2} dz \left(\frac{Y + 2 - X \cos y}{\sqrt{\dots_1}} + \frac{Y + 2 + X \cos y}{\sqrt{\dots_2}} \right) \quad (3.38)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\dots}_1 &= \sqrt{Y(1 - \cos ck_z) + X(\cos ak_x - \cos ak_y) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \times \\ &\times \sqrt{Y(1 + \cos ck_z) - X(\cos ak_x + \cos ak_y) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \end{aligned} \quad (3.39)$$

$$\begin{aligned} \sqrt{\dots}_2 &= \sqrt{Y(1 - \cos ck_z) - X(\cos ak_x - \cos ak_y) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \times \\ &\times \sqrt{Y(1 + \cos ck_z) + X(\cos ak_x + \cos ak_y) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \end{aligned} \quad (3.40)$$

Pošto smo isti problem odradili uz pomoć dve različite metode i stigli do granice primenljivosti analitičkih metoda, vreme je da se okrenemo numeričkoj obradi rezultata i poredjenju sa eksperimentalnim podacima.

Glava 4

Numerička analiza rezultata

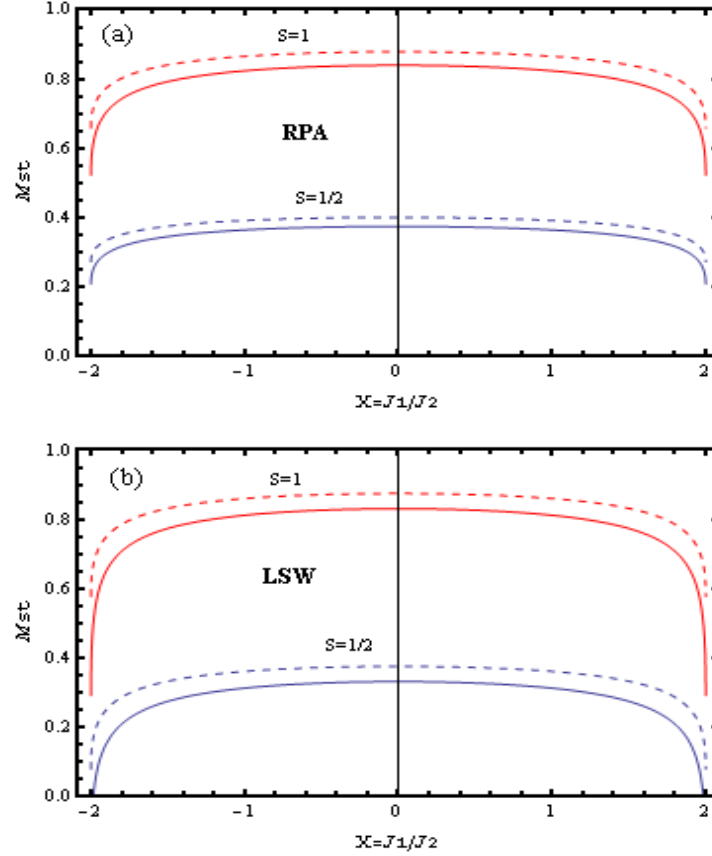
4.1 Magnetizacija

Magnetizaciju na apsolutnoj nuli smo dobili kao funkciju parametara frustracije $X = J_1/J_2$ i $Y = J_c/J_2$ u aproksimaciji slučajnih faza (jednačine (2.63) i (2.64)) i u Blohovoju aproksimaciji (jednačina (3.37)). Iako se integrali I i I' koji se pojavljuju u ovim izrazima ne mogu naći analitičkim putem, magnetizaciju ipak možemo naći numeričkim metodama, odnosno upotrebom kompjuterskog programa *Mathematica* 7.0. Na Slici 4 prikazane su magnetizacije dobijene u RPA i LSW pristupima kao funkcije parametra frustracije X , za dve različite vrednosti parametra Y i za spinove $S = 1/2$ i $S = 1$. Magnetizacije su date u jedinicama Borovog magnetona (μ_B).

Vidimo da su krive u RPA i LSW pristupima skoro identične. Takodje, magnetizacije za spinove $S = 1/2$ i $S = 1$ se kvalitativno isto ponašaju. Medjutim, ono što pravi značajnu razliku, kako izmedju RPA i LSW pristupa, tako i izmedju različitih spinova, jeste uloga kvantnih fluktuacija i treće dimenzije. Uticaj kvantnih fluktuacija se jasno vidi na svim graficima, jer i na temperaturi apsolutne nule (na kojoj bi po klasičnim zakonima trebalo da važi $\langle \hat{S}_z \rangle = S$), magnetizacija po Fe čvoru nije maksimalna moguća, tj. $\langle \hat{S}_z \rangle < S$.

Sa grafika takodje vidimo da inter-ravanska interakcija, okarakterisana integralom izmene J_c , ima znatan uticaj jer većoj vrednosti parametra $Y = J_c/J_2$ odgovaraju značajno veće vrednosti magnetizacije. Ovo znači da inter-ravanska interakcija potiskuje kvantne fluktuacije, odnosno jača magnetizaciju. No, pun značaj treće dimenzije (odnosno kuplovanja izmedju ravni) se može uvideti samo ako se zna nešto o rezultatima 'čistog' $J_1 - J_2$ modela. U modelu koji ne uzima u obzir interakciju izmedju ravni, kvantne fluktuacije poseduju osobinu logaritamske divergencije. To znači da u $J_1 - J_2$ modelu sve krive za magnetizaciju idu u nulu pri $|X| \rightarrow 2$, bez obzira na spin [21]. Sa Slike 4 je očigledno da u tri dimenzije ovo pravilo više ne važi. Štaviše, jedina kriva koja ide u nulu pri $|X| \rightarrow 2$ je LSW kriva za $S = 1/2$ i $Y = 0.01$. Činjenica da u tri dimenzije magnetizacija može imati konačnu vrednost za $X = 2$ otvara mogućnost postojanja nekih neobičnih nestabilnosti magnetnog uredjenja, o čemu će više reći biti u narednom odeljku.

Na osnovu dobijenih rezultata možemo nešto više reći i o slaganju modela sa eksperimentima, kroz poredjenje sa izmerenim magnetnim momentima izloženim u Tabeli 1. Zbog komplikovanih lokalnih elektronskih interakcija nije još sa sigurnošću poznato koji spinski kvantni broj S treba koristiti za opis pniktida gvoždja, ali uspeh pojedinih računa sugerise da treba



Slika 4: Magnetizacija u funkciji parametra $X = J_1/J_2$ u aproksimaciji slučajnih faza (a) i Blohovej aproksimaciji (b). Dati su rezultati za spinove $S = 1/2$ i $S = 1$. Puna linija odgovara vrednosti parametra $Y = 0.01$, a isprekidana vrednosti $Y = 0.1$.

izabrati spin $S = 1$ [27]. Dakle, poredimo krive za spin 1 sa eksperimentalnim momentima iz Tabele 1. Vidimo da su rezultati za jedinjenja $\text{Ca}(\text{Ba},\text{Sr})\text{Fe}_2\text{As}_2$ zadovoljavajući jer za širok opseg parametra X magnetizacija ima vrednosti bliske onima koje dobijamo u eksperimentu. Sa druge strane, za jedinjenja $\text{La}(\text{Nd})\text{FeAs}$ rezultati se ne mogu smatrati dobrim. U principu, izuzetno mali magnetni momenti izmereni u ovim jedinjenjima se mogu objasniti u okviru našeg modela ako se za parametar X uzmu vrednosti vrlo bliske 2 (drugim rečima, ako se ova jedinjenja nalaze vrlo blizu kvantnom faznom prelazu). Medjutim, pošto u blizini $X = 2$ magnetizacija jako zavisi od parametra X , teorijsko dobijanje vrednosti izmerenih u $\text{La}(\text{Nd})\text{FeAs}$ bi zahtevalo značajno 'naštimanje' (fine-tuning). Štaviše, čini se da je u okviru RPA pristupa nemoguće dobiti ovako male vrednosti za magnetizaciju, osim možda za vrednosti parametra Y niže od 0.01.

U okviru našeg modela, dakle, izuzetno malu vrednost lokalnih magnetnih momenata možemo objasniti jakim kvantnim fluktuacijama, odnosno pretpostavkom da se sistem nalazi blizu kvantnom faznom prelazu. Slaganje teorijskih rezultata sa eksperimentom bi tada mogli postići 'naštimanjem'. Činjenica da smo dobili donekle loše rezultate za magnetizaciju ne znači da naš modelni Hamiltonijan (1.5) ne može da pruži zadovoljavajući opis magnetnih osobina pniktida gvoždja. Magnetizacija može značajno da zavisi od kolektivnih stepeni slobode (koje smo zanemarili), hibridizacije ili drugih efekata koje je teško uzeti u obzir. Sa druge

strane, zakon disperzije za magnone zavisi samo od modelnog Hamiltonijana i ničeg drugog, te stoga ispitivanje disperzije predstavlja znatno bolji test primenljivosti modela na pniktide gvoždja.

4.2 Zakon disperzije i Goldstonov mod

U ovom odeljku ćemo detaljno ispitivati energetska granu E_2 . Pogodno je da u izrazu za E_2 figurišu parametri frustracije X i Y . Zbog toga jednačinu (2.31) delimo sa J_2 , što nam daje

$$E_2/J_2 = 2\sigma \sqrt{Y(1 + \cos z) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel})) + X(\cos x + \cos y)} \times \quad (4.1)$$

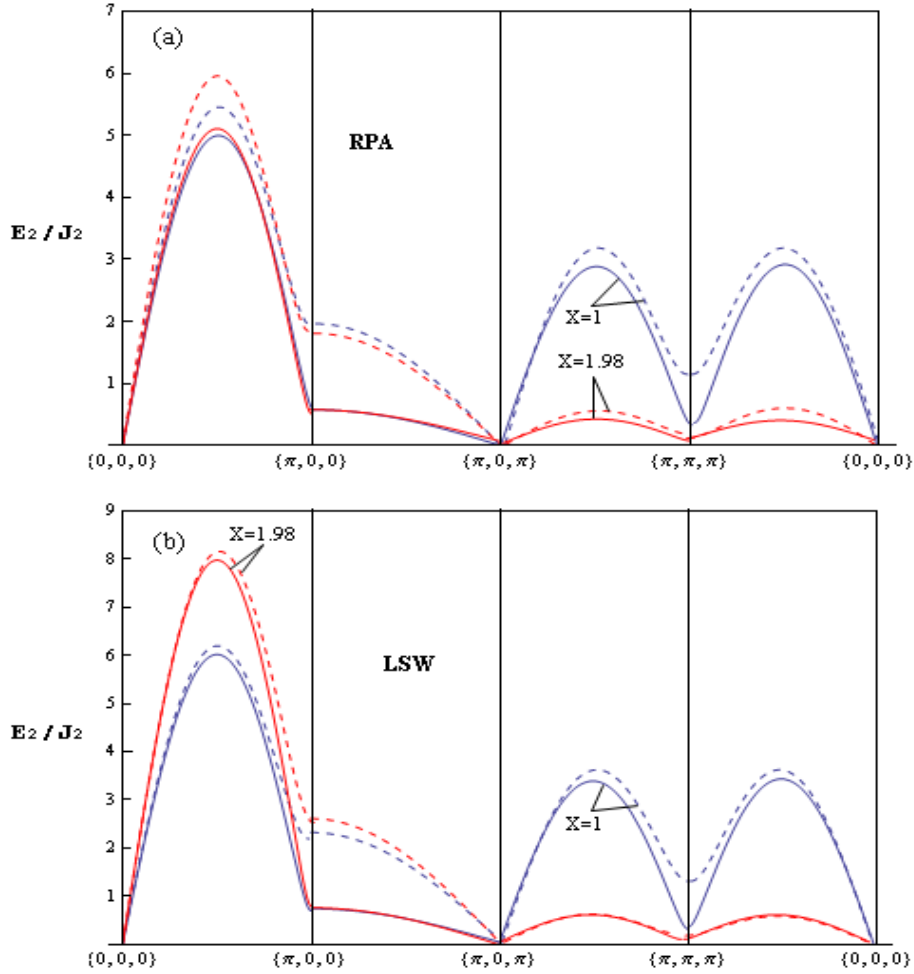
$$\times \sqrt{Y(1 - \cos z) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel})) - X(\cos x - \cos y)} \quad (4.2)$$

Ovo je, naravno, rezultat u aproksimaciji slučajnih faza, za rezultat u Blohovoju aproksimaciji treba izvršiti zamenu $\sigma \rightarrow S$. Promenljive x, y, z smo uveli relacijom (2.62). Na Slici 5 prikazani su preseki energetske grane E_2/J_2 kroz neke tačke simetrije Brilluenove zone. Dati su rezultati za RPA i LSW pristupe, i to za sistem koji je duboko u fazi sa trakastim spinskim uredjenjem ($X = 1$) i za sistem blizu kvantnom faznom prelazu ($X = 1.98$). Svi rezultati su za spin $S = 1$. Zbog simetrija u zakonu disperzije, mogli smo umesto grane E_2 crtati granu E_1 , dobili bi se isti rezultati uz nešto drugačiji raspored slika.

Nadalje ćemo scenario u kome se sistem nalazi blizu kvantnog faznog prelaza nazivati kritični scenario, a onaj u kome je sistem duboko u fazi sa trakastim uredjenjem ćemo nazivati nekritični scenario. Sa Slike 5 vidimo da se kvalitativno krive za RPA i LSW pristup ponašaju skoro identično, s tim što su vrednosti energije znatno veće u Blohovoju aproksimaciji. Takodje, u Blohovoju aproksimaciji je i znatno veća razlika između kritičnog i nekritičnog scenarija.

Da bismo mogli u potpunosti da cenimo informacije koje nam pruža Slika 5, moramo nešto ukratko reći o Goldstonovoj teoremi. Jedna od karakteristika Hajzenbergovog Hamiltonijana je njegova invarijantnost u odnosu na transformacije $SO(3)$ u spinskom prostoru. Drugim rečima, Hajzenbergov Hamiltonijan je invarijantan u odnosu na trodimenzione rotacije spinskih operatora. Sa druge strane, klasično osnovno stanje antiferomagneta (pod 'klasičnim' podrazumevamo odsustvo kvantnih fluktuacija) je Nelovo stanje, koje je invarijantno u odnosu na transformacije $SO(2)$ (rotacije u ravni) spinskih operatora. To je stoga što u Nelovom stanju postoji povlašćena osa u spinskom prostoru, i nju obično označavamo kao z osu. Ukratko, Nelovo stanje ima nižu simetriju od Hajzenbergovog Hamiltonijana.

Goldstonova teorema tvrdi da ako osnovno stanje sistema poseduje nižu simetriju od Hamiltonijana koji opisuje dati sistem, pri izlasku iz osnovnog stanja (na primer, zbog termičkih fluktuacija) kao pobudjenja sistema javljaju se Goldstonovi bozoni [28]. Za formiranje Goldstonovih bozona potreban je iščezavajuće mali iznos energije. Energije Goldstonovih bozona teže nuli kad talasni vektor bozona teži nuli tj. $E \rightarrow 0$ pri $|\mathbf{k}| \rightarrow 0$. U neku ruku, možemo razmišljati o Goldstonovim bozonima kao pobudjenjima koja se 'brinu' da sistem pri izlasku iz osnovnog stanja dobije istu simetriju koju ima Hamiltonijan koji opisuje sistem.



Slika 5: Energetska grana E_2/J_2 u aproksimaciji slučajnih faza (a) i Blohovoј aproksimaciji (b). Crvenom linijom izvučene su krive za kritični scenarij ($X = 1.98$) a plavom za nekritični ($X = 1$). Pune linije odgovaraju vrednosti parametra $Y = 0.01$, a isprekidane vrednosti $Y = 0.1$. Svi rezultati su za spin $S = 1$.

Modovi pobudjenja za koje je potreban iščezavajuće mali iznos energije se zovu Goldstonovi modovi. Sa Slike 5 vidimo da postoje dva Goldstonova moda: $E(0,0,0)$ i $E(\pi,0,\pi)$. Postoje i druge grane pobudjenja (na primer, $E(\pi,\pi,\pi)$), ali one poseduju energetski 'gep' (procep), odnosno za njihovo formiranje je potreban konačan iznos energije. Zbog toga je u eksperimentima neutronskog rasejanja Goldstonov mod dominantan, odnosno najveći broj neutrona se rasejava od magnona koji pripadaju Goldstonovom modu. Za sada postojanje bilo kakvih sekundarnih grana pobudjenja kod pniktida gvoždja još nije eksperimentalno potvrđeno.

Informaciju o brzini spinskih talasa u Goldstonovom modu možemo dobiti razvojem izraza za energiju u red oko $(0,0,0)$, odnosno $(\pi,0,\pi)$. Uz pomoć identiteta $\cos(\pi - x) = -\cos x$ i iz samog izraza za energiju (4.1) lako je uvideti da će razvoj oko $(0,0,0)$ dati isti rezultat kao razvoj oko $(\pi,0,\pi)$. Koristimo aproksimaciju $\cos x \sim 1 - x^2/2$, koja važi pri $x \approx 0$, i odbacujemo članove tipa x^4, x^2y^2 , čime dobijamo (u jednačini se vraćamo sa notacije promenljivih x, y, z

na ak_x, ak_y, ck_z da oznake brzina duž koordinatnih osa ne bi zbunjivale):

$$E_2/J_2 \sim \sqrt{v_{x_r}^2 (ak_x)^2 + v_{y_r}^2 (ak_y)^2 + v_{z_r}^2 (ck_z)^2} \quad (4.3)$$

Ovde su 'redukovane' brzine $v_{x_r}, v_{y_r}, v_{z_r}$ jednake:

$$v_{x_r} = \frac{v_x}{J_2} = 2\sigma \sqrt{(2+X)(2+X+Y)} \quad (4.4)$$

$$v_{y_r} = \frac{v_y}{J_2} = 2\sigma \sqrt{(2-X)(2+X+Y)} \quad (4.5)$$

$$v_{z_r} = \frac{v_z}{J_2} = 2\sigma \sqrt{Y(2+X+Y)} \quad (4.6)$$

Opet, ovo su rezultati u RPA, za Blohovu aproksimaciju treba izvršiti zamenu $\sigma \rightarrow S$. Grafički prikaz ovih brzina dat je na Slici 6. Rezultati su dati samo u RPA pristupu, u LSW brzine v_x i v_z ne idu u 0.

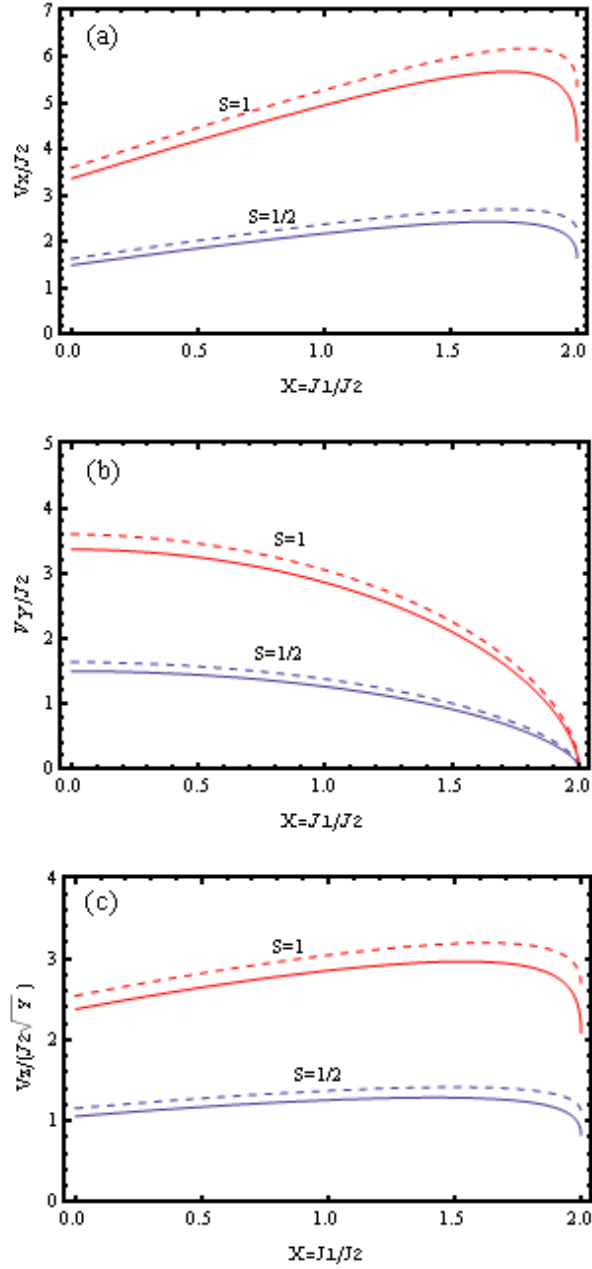
Sad možemo nešto reći o dve vrste nestabilnosti trakastog spinskog poretka koje su moguće u tri dimenzije. Prva vrsta nestabilnosti je moguća za male vrednosti parametra Y . Naime, ako je Y dovoljno malo, magnetizacija teži nuli pri $X \rightarrow 2$ (videti Sliku 4(b) za $S = 1/2$ i $Y = 0.01$). Nestajanje dugodometnog uredjenja za $X = 2$ možemo uslovno nazvati 'običnom' nestabilnošću faze sa trakastim uredjenjem. Sa druge strane, za dovoljno velike vrednosti Y , magnetizacija je konačno velika za $X = 2$, ali zato brzina v_y nije (videti jednačinu (4.5)). Ovo nam govori da za dovoljno veliko Y i $X = 2$, dugodometno magnetno uredjenje opstaje, ali ne opstaje trakasti spinski poredak. Kritična vrednost parametra Y , koja razdvaja ove dve vrste nestabilnosti trakastog poretka, zavisi od spina i očigledno se smanjuje sa porastom spina, videti Sliku 4. U ovom radu se nećemo dalje baviti ovim različitim nestabilnostima trakastog spinskog uredjenja.

Zbog poredjenja sa rezultatima eksperimenata trebaće nam odnos v_y/v_x , koji lako nalazimo iz (4.4) i (4.5):

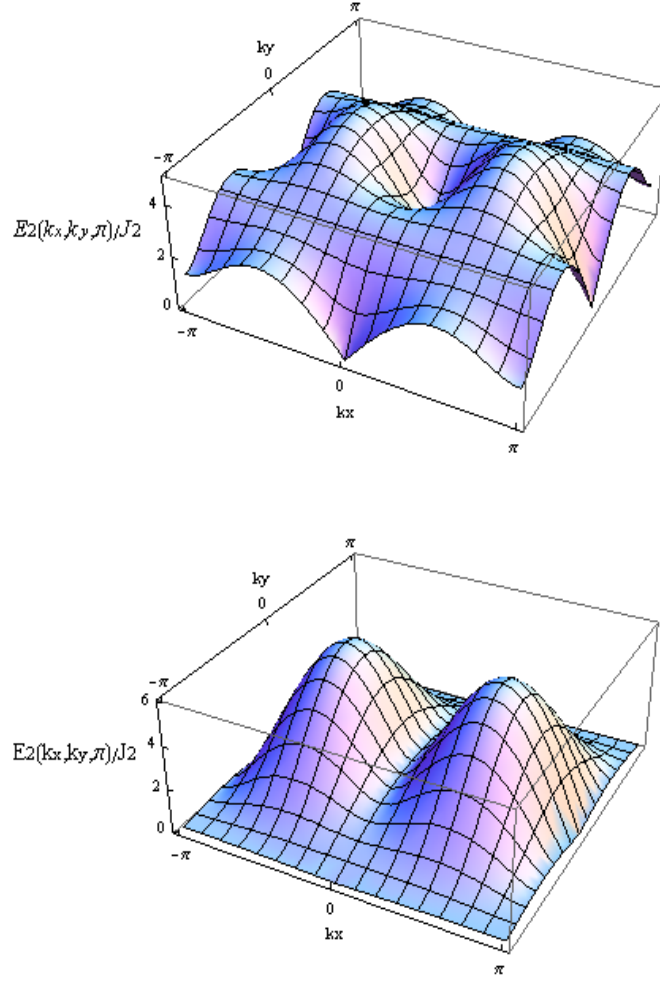
$$\frac{v_y}{v_x} = \frac{v_{y_r}}{v_{x_r}} = \sqrt{\frac{2-X}{2+X}} \quad (4.7)$$

Brzine spinskih talasa su merene duž x i z osa u eksperimentima neutronsog rasejanja na SrFe_2As_2 i BaFe_2As_2 i rezultati su $v_x \approx 205$ meV i $v_z \approx 45$ meV (za oba jedinjenja su dobijene ove vrednosti). Na grafiku 6(a) brzina v_x je data u jedinicama J_2 , a na grafiku 6(c) brzina v_z je data u jedinicama $J_2\sqrt{Y}$. Izvesni dodir sa eksperimentom bi mogli postići ako bi imali bar neku okvirnu vrednost za integral izmene J_2 . Računi vezani za zonsku strukturu u pniktidima gvoždja daju rezultat $J_2 \approx 33$ meV [29]. Ako prihvatimo ovu vrednost J_2 , krive za $S = 1$ na grafiku 6(a) uglavnom daju vrednost za v_x koja je nešto niža od izmerene, ali se ni ne spušta ispod 100 meV, osim ako je sistem jako blizu kvantnom faznom prelazu.

Eksperimentalno dobijanje brzine v_y , koja je na grafiku 6(b) takodje data u jedinicama J_2 , predstavlja nešto veći izazov. Na tom polju zasad postoje neki vrlo oprečni rezultati. Eksperimenti neutronsog rasejanja³ sugerišu da je brzina v_y po vrednosti bliska v_x , dok analiza uz pomoć nuklearne magnetne rezonance³⁰ vodi na zaključak da je v_y za čitav red veličine manja od v_x i da iznosi između 10 i 30 meV. Na osnovu grafika 6(a) i 6(b), kao i na osnovu jednačine (4.7), vidimo da u okviru našeg modela v_y može biti za red veličine manje od v_x samo u kritičnom scenariju.



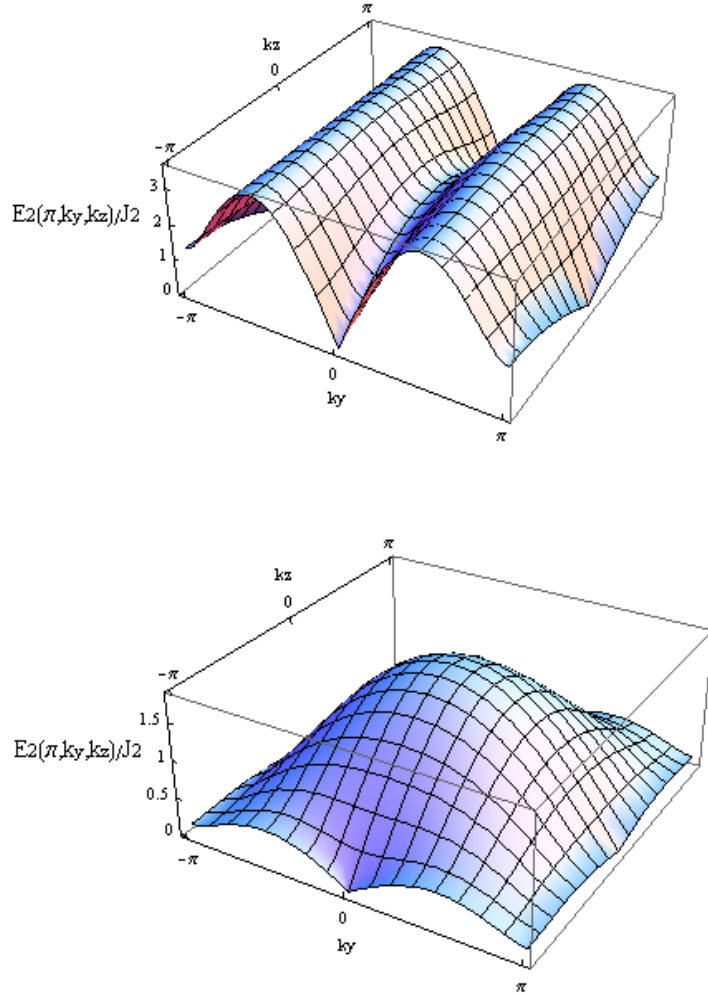
Slika 6: Brzine spinskih talasa duž x (a), y (b) i z ose(c). Punom linijom su izvučene krive za vrednost parametra $Y = 0.01$, a isprekidanom za vrednost $Y = 0.1$.



Slika 7: Disperzija spinskih talasa u ravni x, y za spin $S = 1$ i parametar $Y = 0.1$. Dati su rezultati za kritični scenario tj. $X = 1.96$ (dole) i za nekritični scenario tj. $X = 0.7$ (gore).

Zbog ovih nedoumica u vezi sa brzinom v_y , moramo uzeti u razmatranje oba scenarija, i kritični i nekritični. Za kritični scenario, služimo se podacima dobijenim uz pomoć NMR, i rezultatima iz [30], koji za odnos v_y/v_x daju vrednost od približno 0.1. Za nekritični scenario, uzimamo podatke dobijene neutronske raseljanjem, koji za odnos v_y/v_x daju $v_y/v_x \approx 0.7$. Ubacivanjem vrednosti $v_y/v_x = 0.1$ i $v_y/v_x = 0.7$ u (4.7) dobijamo rezultate $X = 1.96$ (kritični scenario) i $X = 0.68$. (nekritični scenario). Vrednost X za nekritični scenario zaokružujemo na $X = 0.7$. Dakle, za kritični scenario biramo vrednost parametra $X = 1.96$, a za nekritični biramo vrednost $X = 0.7$. Disperzija u ravni x, y je prikazana na Slici 7 za oba scenarija, a disperzija u ravni y, z je prikazana na Slici 8, takodje za oba scenarija. Na svim slikama za parametar Y uzeta je vrednost 0.1. Uzeti su samo rezultati u RPA pristupu.

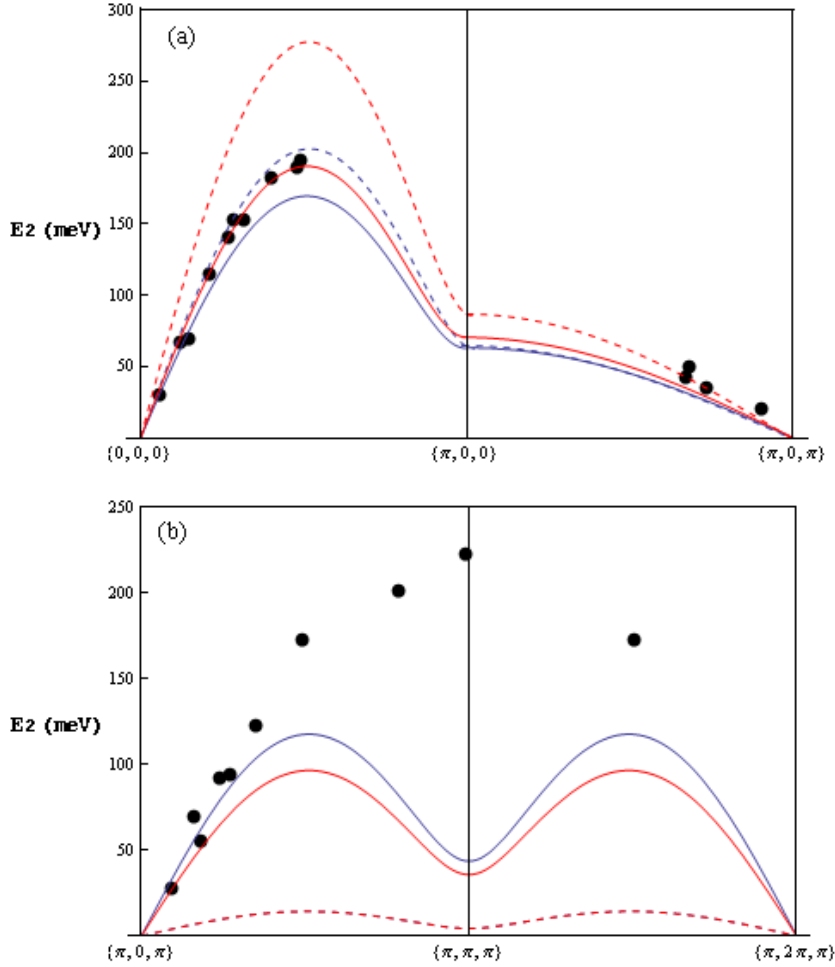
Disperzija u ravni y, z je korisna jer pokazuje uticaj inter-ravanske interakcije i koliko se spinski talasi prostiru duž z ose. Takodje predstavlja način da se utvrdi da li jake kvantne fluktuacije opstaju i u tri dimenzije. Naravno, grafici na Slikama 7 i 8 predstavljaju samo uopšteni kvalitativni pregled. Kvantitativno poredjenje izmedju kritičnog i nekritičnog scenarija u odnosu na podatke dobijene u eksperimentima neelastičnog neutronske raseljanja dato je na Slici 9.



Slika 8: Disperzija spinskih talasa u ravni y, z za spin $S = 1$ i parametar $Y = 0.1$. Dati su rezultati za kritični scenario tj. $X = 1.96$ (dole) i za nekritični scenario tj. $X = 0.7$ (gore).

Crne tačke na Slici 9 predstavljaju vrednosti dobijene eksperimentima neelastičnog neutronskeg rasejanja na CaFe_2As_2 . Podaci su preuzeti iz [3]. Teorijski izračunata disperzija je iz jedinica J_2 prebačena u jedinice meV uz pomoć procene iz zonske teorije $J_2 \approx 33$ meV. Na slici 9a) vidimo da najbolje slaganje sa eksperimentima u intervalu $(0, 0, 0) - (\pi, 0, 0)$ daje LSW kriva u nekritičnom scenariju, ali zato najlošije rezultate u istom intervalu daje LSW kriva za kritični scenario. Uprkos izvesnim neslaganjima, u suštini sve krive na Slici 9a) približno prate eksperimentalne podatke, a odstupanja izmedju teorije i eksperimenta su prihvatljiva (osim možda u slučaju LSW krive za kritični scenario). I dok Slika 9a) ostavlja prostora za neke do-rade i diskusije, Slika 9b) uklanja sve nedoumice vezane za primenu izotropnog Hajzenbergovog $J_1 - J_2 - J_c$ modela na pniktide gvoždja.

Prva stvar koja pleni pažnju na Slici 9b) je izuzetno neslaganje krive za kritični scenario (isprekidana linija) sa eksperimentalnim podacima. Ovo sugerise da se pniktidi, ako je izotropni $J_1 - J_2 - J_c$ model primenjiv na njih, nalaze duboko u fazi sa trakastim uredjenjem i sa $X \approx 0.7$. Ovaj zaključak je u skladu sa rezultatima zonske teorije koja predvidja da integrali izmene J_1 i J_2 imaju približno istu vrednost. Takodje primećujemo da su krive za kritični scenario identične u RPA i LSW pristupu (krive se preklapaju).



Slika 9: Poredjenje disperzija iz teorije i eksperimenta neelastičnog neutronskeg rasejanja. Dati su teorijski rezultati za RPA (plava linija) i LSW (crvena linija). Krive za nekritični scenario su izvučene punom linijom, a za kritični scenario su izvučene isprekidanom linijom. Crne tačke predstavljaju eksperimentalne podatke, preuzete iz [3].

Medjutim, jasno je da ni nekritični scenario ne daje zadovoljavajuće rezultate. Krive za nekritični scenario samo donekle prate eksperimentalne podatke. Na središnjem delu oblasti $(\pi, 0, \pi) - (\pi, 2\pi, \pi)$ i u ovom scenariju se javlja izuzetno odstupanje izmedju teorije i eksperimenta. Dakle, ako odnos brzina v_y/v_x (odnosno parametar X) odaberemo tako da se poklapa sa rezultatima dobijenim neelastičnim neutronskeg rasejanjem, dobijamo zakon disperzije koji se ne poklapa u svim oblastima sa eksperimentalnom disperzijom u okviru istog eksperimentalnog postupka. Ovo nas konačno vodi na zaključak da izotropni Hajzenbergov $J_1 - J_2 - J_c$ model nije u potpunosti primenljiv na pniktide gvoždja. U Prilogu A je pokazano da drugačiji izbor integrala izmene ($J_1 = -J_1^F$) daje bolje rezultate za disperziju u intervalu $(\pi, 0, \pi) - (\pi, 2\pi, \pi)$. Nažalost, pri izboru $J_1 - J_1^F$ javljaju se neki drugi ozbiljni problemi, zbog kojih se čini da je 'loš' izbor, koji smo koristili u glavnom delu rada, ipak ispravan. Stoga ne možemo kriviti specifičan odabir integrala izmene za izvesna neslaganja izmedju teorijskog modela i eksperimentalnih činjenica.

U referenci [3] se spominje mogućnost da se eksperimentalni podaci mogu dobro opisati teorijski ako se koristi $J_1 - J_2 - J_c$ model u kome postoji dodatna prostorna anizotropija. Ova dodatna anizotropija se odnosi na integrale izmene J_1 i J_1^F . Prema referenci [3], eksperimentalni rezultati se mogu gotovo savršeno reprodukovati teorijski ako se za NN integrale izmene u ravni uzme $J_1 \gg J_1^F$. Još nije sasvim jasno kako bi se fizički mogao opravdati ovakav izbor. Kao moguće objašnjenje navode se, između ostalog, dodatni stepeni slobode (orbitalni) i uticaj prelaza iz tetragonalne u ortorombičnu strukturu. Zasad se ipak kao najverovatnije objašnjenje čini uticaj bikvadratne interakcije [31]. U ovom radu se nećemo dalje baviti ovom problematikom.

Glava 5

Zaključak

U ovom radu izveden je pokušaj da se magnetne osobine jedinjenja baziranih na FeAs grupi opišu pomoću izotropnog $J_1 - J_2 - J_c$ Hajzenbergovog modela. Modelni Hamiltonijan i osnovno stanje koje iz njega sledi analizirani su pomoću 2 metoda. Prvi metod je spinski formalizam u aprkosimaciji slučajnih faza (RPA) a drugi je bozonski formalizam u Blohovojoj aproksimaciji. LSW pristup je odradjen više kao dopuna i radi potvrde nekih osnovnih rezultata RPA pristupa. U oba pristupa korišćen je metod Grinovih funkcija sa kojima su dobijeni izrazi za magnetizaciju i disperziju na proizvoljnoj temperaturi. Posebno su analizirani rezultati samo za temperaturu apsolutne nule.

Krive za magnetizaciju dobijene numeričkim putem se dobro slažu sa eksperimentalnim podacima za $\text{Ca}(\text{Ba},\text{Sr})\text{Fe}_2\text{As}_2$. Medjutim, podaci za $\text{La}(\text{Nd})\text{FeAs}$ se u okviru razmatranog modela mogu dobiti samo ako se pretpostavi da se arsenidi gvoždja nalaze vrlo blizu kvantnom faznom prelazu, i ako se koristi značajno naštimavanje (fine-tuning). Neuspeh modela da zadovoljavajuće objasni izmerene magnetne momente ipak ne znači da modelni Hamiltonijan ne može da se primenjuje na arsenide gvoždja. Magnetizacija može da zavisi od faktora koji su u radu zanemareni, kao što su hibridizacija i spin-orbitalna interakcija. Sa druge strane, disperzija zavisi samo od Hamiltonijana i stoga predstavlja bolji test primenljivosti razmatranog modela na arsenide gvoždja.

Razmatranjem disperzije uočeno je postojanje Goldstonovih modova i dobijeni su izrazi za brzine spinskih talasa u Goldstonovom modu. Eksperimentalno poznavanje brzina spinskih talasa bi omogućilo odredjivanje parametra frustracije $X = J_1/J_2$ i, možda, parametra $Y = J_c/J_2$. Medjutim, zbog velikih nesigurnosti u pogledu vrednosti brzine v_y , u radu su razmatrana dva scenarija-kritični ($X \approx 2$) i nekritični ($X \approx 0.7$). Teorijski izračunata disperzija je upoređena sa podacima dobijenim neelastičnim neutronske rasejanjem na CaFe_2As_2 . Ustanovljeno je da nijedan scenario ne može da objasni eksperimentalne podatke u intervalu $(\pi, 0, \pi) - (\pi, 2\pi, \pi)$, iako krive za nekritični scenario bar donekle prate rezultate eksperimenata. Zaključak je da izotropni Hajzenbergov $J_1 - J_2 - J_c$ nije sasvim zadovoljavajući pri opisu magnetnih osobina pniktida gvoždja. Ne treba ipak potpuno ignorisati ni činjenicu da su uz pomoć ovog modela dobijeni neki rezultati koji se lepo slažu sa eksperimentom (magnetizacija u $\text{Ca}(\text{Ba},\text{Sr})\text{Fe}_2\text{As}_2$, disperzija u intervalu $(0, 0, 0) - (\pi, 0, \pi)$). Upotreba Hajzenbergovog modela sa $J_1 \gg J_1^F$ omogućava izuzetno dobro fitovanje teorijskih krivih sa eksperimentalnim podacima. Medjutim, još nije jasno kojim se fizičkim mehanizmom može opravdati ovaj izbor. Zasad se kao najbolje objašnjenje čini uticaj nezanemarljive bikvadratne interakcije. Jasno je da su ovi problemi predmet mnogih aktuelnih istraživanja. Na kraju ostaje još samo da se

naglasiti vrlo bitna činjenica da su pniktidi gvoždja još uvek novi materijali, u smislu da ima još puno toga da se nauči o njima, kako na eksperimentalnom, tako i na teorijskom nivou. Zato ne treba da čudi to što je u radovima koji se bave ovim materijalima (uključujući tu i ovaj rad) uglavnom prisutna velika doza nesigurnosti i nagadjanja. Ako se ponekad i dobiju loši i neočekivani rezultati, to ne treba da obeshrabruje, jer je izvesno da će ulaganje truda vremenom dovesti do pomaka u razumevanju ovih neobičnih materijala.

Prilog A

RPA analiza za $J_1 = -J_1^F$

U radu je već istaknuto da bi naizgled korektan postupak zahtevao odabir integrala izmene $J_1 = -J_1^F$. Mi smo u glavnom delu rada napravili drugačiji izbor da bi mogli da pratimo tok i rezultate osnovne reference. U ovom Prilogu ćemo pokazati kakvi se rezultati dobijaju u aproksimaciji slučajnih faza za $J_1 = -J_1^F$. Ispostaviće se, suprotno očekivanjima, da je ovaj izbor izgleda neispravan jer se dobijaju čudni, fizički čak možda i besmisleni rezultati. U ovom Prilogu ćemo se baviti samo slučajem spina $S = 1$, jer očekujemo da je upravo taj spinski kvantni broj relevantan za pniktide gvoždja. Počinjemo sa energetskim granama E_1 (2.27) i E_2 (2.28). Sa odabirom $J_1 = -J_1^F$ ovi izrazi postaju

$$E_1 = 2\sigma \sqrt{2J_2(1 - \gamma_2(k_{\parallel})) + J_c(1 - \cos ck_z) + J_1(2 + \cos ak_x + \cos ak_y)} \times \\ \times \sqrt{2J_2(1 + \gamma_2(k_{\parallel})) + J_c(1 + \cos ck_z) + J_1(2 - \cos ak_x + \cos ak_y)} \quad (\text{A.1})$$

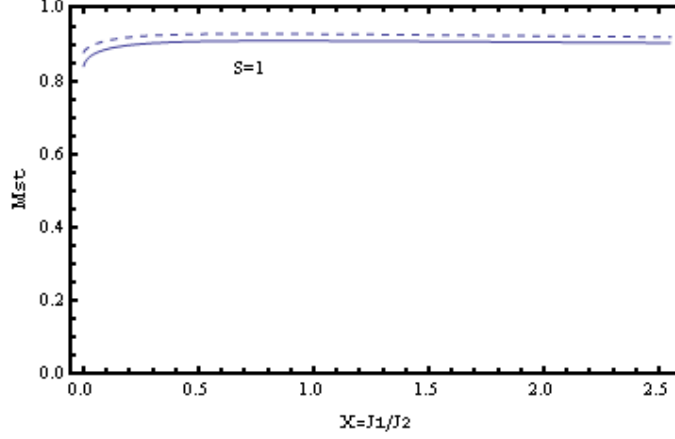
$$E_2 = 2\sigma \sqrt{2J_2(1 - \gamma_2(k_{\parallel})) + J_c(1 - \cos ck_z) - J_1(\cos ak_x + \cos ak_y - 2)} \times \\ \times \sqrt{2J_2(1 + \gamma_2(k_{\parallel})) + J_c(1 + \cos ck_z) + J_1(2 + \cos ak_x - \cos ak_y)} \quad (\text{A.2})$$

Izraz (2.55) koje smo dobili za funkciju $P_S(T)$ (a, samim tim i izraz (2.56) za funkciju $P_S(0)$) ostaje nepromenjen, jer u dobijanju ovih zavisnosti nigde nije eksplicitno napravljen izbor za integrale izmene. Funkcionalni oblik magnetizacije za spin 1 je isti kao u jednačini (2.64), ali sada je integral I nešto komplikovaniji:

$$I = \frac{4}{\pi^3} \int_0^{\pi/2} dx \int_0^{\pi} dy \int_0^{\pi/2} dz \left(\frac{Y + 2 + X(2 + \cos y)}{\sqrt{\dots}_1} + \frac{Y + 2 + X(2 - \cos y)}{\sqrt{\dots}_2} \right) \quad (\text{A.3})$$

$$\sqrt{\dots}_1 = \sqrt{Y(1 - \cos ck_z) + X(2 + \cos ak_x + \cos ak_y) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \times \\ \times \sqrt{Y(1 + \cos ck_z) + X(2 - \cos ak_x + \cos ak_y) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \quad (\text{A.4})$$

$$\sqrt{\dots}_2 = \sqrt{Y(1 - \cos ck_z) - X(\cos ak_x + \cos ak_y - 2) + 2(1 - \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \times \\ \times \sqrt{Y(1 + \cos ck_z) + X(2 + \cos ak_x - \cos ak_y) + 2(1 + \gamma_2(\mathbf{k}_{\parallel}))} \quad (\text{A.5})$$



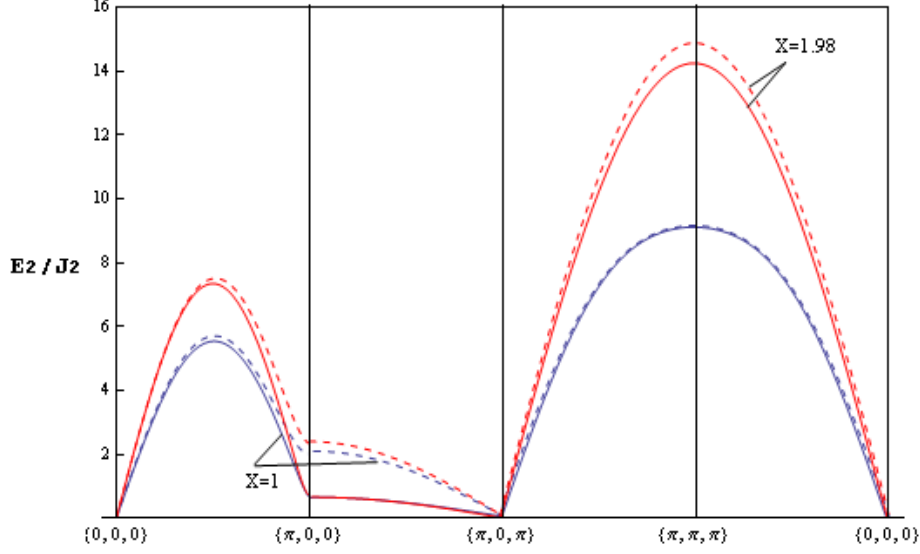
Slika 10: Magnetizacija u funkciji $X = J_1/J_2$ pri izboru $J_1 = J_1^F$, za spin $S = 1$. Puna linija odgovara vrednosti $Y = 0.01$ a isprekidana vrednosti $Y = 0.1$.

Numerički rezultati za magnetizaciju kao funkciju X prikazani su na Slici 10. Zbog komplikovanijeg integrala I , nacrtani su samo rezultati počev od $X = 0$. Krive za magnetizaciju na Slici 10 se svakako dosta razlikuju od krivih prikazanih na Slici 4. Sa jedne strane, čini se da je uticaj treće dimenzije zanemarljiv jer se krive za $Y = 0.01$ i $Y = 0.1$ vrlo malo razlikuju. Medjutim, primećujemo da u modelu sa $J_1 = -J_1^F$ kvantne fluktuacije takodje imaju mnogo manji uticaj nego pri $J_1 = J_1^F$. Magnetizacija na Slici 10 je vrlo blizu klasičnoj vrednosti na apsolutnoj nuli, i to nezavisno od jačine inter-ravanske interakcije. Takodje, zavisnost od parametra X je znatno slabija nego u modelu sa $J_1 = J_1^F$. Za širok opseg parametra X magnetizacija je praktično konstanta, i samo za $X \approx 0$ postoji neznatan pad u vrednosti. Kriva je izvučena sve do $X = 2.55$, i čini se da ne postoji neka gornja granica za X nakon koje vrednost za magnetizaciju ima značajan pad. Po ovome se model sa $J_1 = -J_1^F$ dosta razlikuje od modela sa $J_1 = J_1^F$.

Za dalji test modela analiziraćemo zakon disperzije. Crtaćemo energetska granu E_2 duž pravaca simetrije u Brillouenovoj zoni. Kao i ranije, pogodno je da izraz za E_2 podelimo sa J_2 , što nam daje

$$\begin{aligned}
 E_2/J_2 = & 2\sigma \sqrt{2(1 - \gamma_2(k_{\parallel})) + Y(1 - \cos z) - X(\cos x + \cos y - 2)} \times \\
 & \times \sqrt{2(1 + \gamma_2(k_{\parallel})) + Y(1 + \cos z) + X(2 + \cos x - \cos y)} \quad (\text{A.6})
 \end{aligned}$$

Veličine x, y, z su uvedene relacijom (2.62). Zavisnost E_2/J_2 od ovih veličina je prikazana na Slici 11, za dve vrednosti parametra X ($X = 1.98$ i $X = 1$) i dve vrednosti parametra Y ($Y = 0.1$ i $Y = 0.01$). Upoređujući Sliku 11 sa Slikom 5, uočavamo drastičnu razliku u oblasti $(\pi, 0, \pi) - (0, 0, 0)$, pogotovo za krive $X = 1.98$. No, vidimo da su Goldstonovi modovi ostali isti: $E(0, 0, 0)$ i $E(\pi, 0, \pi)$. Razvijajući zakon disperzije u okolini bilo kog od ova dva moda,



Slika 11: Energetska grana E_2/J_2 dupravaca simetrije u Brilluonovoj zoni. Dati su rezultati za $X = 1$ (plava linija) i $X = 1.98$ (crvena linija). Isprekidane linije odgovaraju vrednosti parametra $Y = 0.1$ a pune linije vrednosti $Y = 0.01$. Svi rezultati su za spin $S = 1$.

dobijamo disperziju u obliku (4.3), ali sada su 'redukovane' brzine jednake:

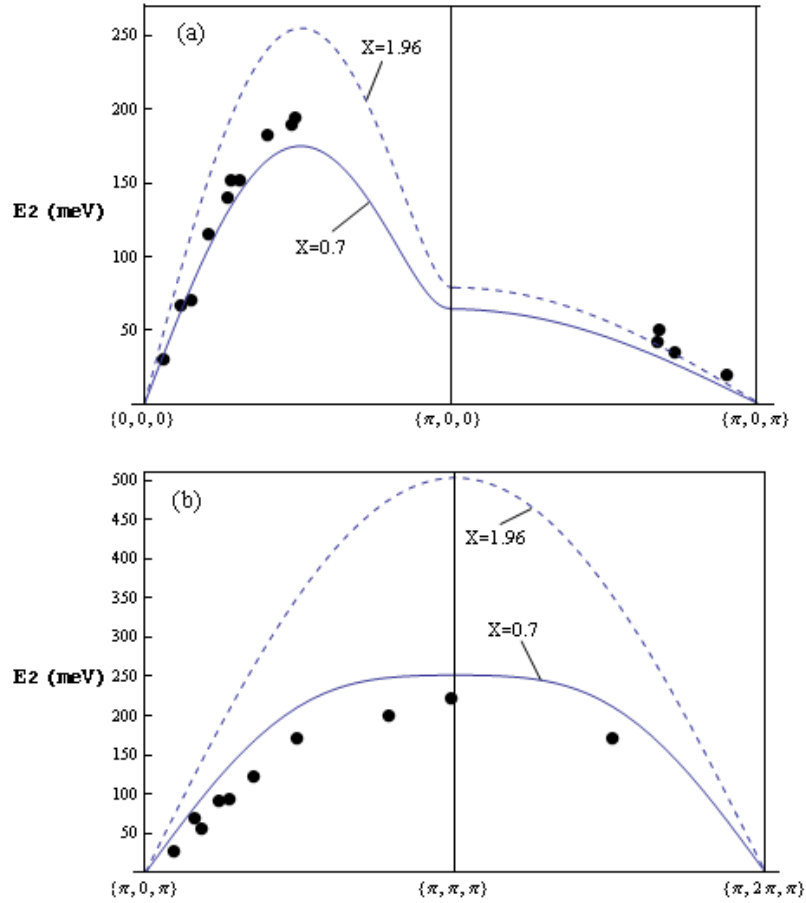
$$v_{x_r} = \frac{v_x}{J_2} = 2\sigma \sqrt{(2+X)(2+X+Y)} \quad (\text{A.7})$$

$$v_{y_r} = \frac{v_y}{J_2} = 2\sigma \sqrt{(2+X)(2+X+Y)} \quad (\text{A.8})$$

$$v_{z_r} = \frac{v_z}{J_2} = 2\sigma \sqrt{Y(2+X+Y)} \quad (\text{A.9})$$

Došli smo do pomalo iznenadjujućeg rezultata $v_y/v_x = 1$. Ovo nažalost nije u skladu ni sa rezultatima dobijenim nuklearnom magnetnom rezonancom ($v_y/v_x \approx 0.1$), ni sa rezultatima dobijenim neelastičnim neutronske rasejanjem. ($v_y/v_x \approx 0.7$). Pored toga, konstantnost odnosa v_y/v_x nam onemogućava da na osnovu informacija o brzinama procenimo vrednost parametra X . Pošto ne znamo ništa o mogućim vrednostima parametra X , bespredmetno je da nastavimo sa analizom zakona disperzije i da vršimo kvantitativno poredjenje sa rezultatima neelastičnog neutronske rasejanja. No, radi formalnog zaokruživanja celine, uporedićemo zakon disperzije (A.6) sa eksperimentom, sa istim izborom parametara koji smo koristili u Glavi 4. Biramo, dakle, dve vrednosti za X , i to $X = 0.7$ i $X = 1.96$, dok Y fiksiramo na 0.1. Za prebacivanje iz jedinica J_2 u meV-e, koristimo procenu $J_2 \approx 33$ meV.

Iz Slike 12 se vidi da se vrednost $X = 1.96$ može odbaciti, dok kriva za $X = 0.7$ daje relativno lepe rezultate čak i u intervalu $(\pi, 0, \pi) - (\pi, 2\pi, \pi)$. Medjutim, ne smemo zaboraviti da su ove dve vrednosti za X odabrane iz čisto formalnih razloga, zato što smo sa istim vrednostima radili u Glavi 4. Ovde je odnos v_y/v_x konstanta koja nam ništa ne govori o parametrima frustracije, tako da nemamo eksperimentalne razloge da odaberemo bilo koju od razmatranih vrednosti za X . I dalje imamo na raspolaganju odnos v_z/v_x , za koji neelastično rasejanje neutrona na $\text{Ba}(\text{Sr})\text{Fe}_2\text{As}_2$ daje $v_z/v_x \approx 0.22$. Iz jednačina (A.7) i (A.9) vidimo da se u ovom odnosu kao nepoznate pojavljuju i X i Y , pa nam je u ovom slučaju poznavanje



Slika 12: Poredjenje teorijske disperzije sa rezultatima neelastičnog neutronskeg rasejanja. Puna kriva odgovara vrednosti parametra $X = 0.7$, a isprekidana vrednosti $X = 1.96$. Svi rezultati su za $Y = 0.1$.

odnosa v_z/v_x neupotrebljivo. Dakle, uprkos zanimljivoj činjenici da smo dobili teorijsku krivu koja lepo prati eksperimentalne rezultate za $X = 0.7$, model sa integralima izmene $J_1 = -J_1^F$ se ne čini relevantnim za pniktide govdja.

Prilog B

Integracija po I Brilluonovoj zoni

I Brilluonova zona predstavlja Vigner-Zajcovu ćeliju u recipročnom prostoru. Vigner-Zajcova ćelija u okolini datog čvora rešetke (bilo direktne, bilo recipročne) se dobija tako što se čvor linijama poveže sa svojim najbližim susedima, a zatim se konstruišu ravni koje polove ove linije. Ovako konstruisane ravni ograničavaju, odnosno formiraju Vigner-Zajcovu ćeliju. Primer konstrukcije I Brilluonove zone u ravni za trakasti spinski poredak dat je na Slici 13. Na Slici 13a) crni i beli krugovi predstavljaju jone Fe^{2+} sa medjusobno suprotnim orijentacijama spinova. Za trakasti poredak u ravni, jasno je da je ispravan izbor elementarne ćelije u direktnom prostoru upravo onaj dat na Slici 13a).

Prvi korak u odredjivanju I Brilluonove zone je nalaženje elementarne ćelije u direktnom prostoru. Elementarna ćelija treba da bude ćelija sa minimalnom zapreminom koja pri translaciji u sva 3 prostorna pravca generiše celu kristalnu rešetku. Pažljivim proučavanjem Slike 3a) i 3b) nije teško ustanoviti da elementarna ćelija u direktnom prostoru ima dimenzije

$$\vec{a}_0 = 2a\vec{e}_x, \vec{b}_0 = a\vec{e}_y, \vec{c}_0 = 2c\vec{e}_z \quad (\text{B.1})$$

Ovakav izbor vektora \vec{a}_0 i \vec{b}_0 je eksplicitno i prikazan na Slici 13a). Zapremina elementarne ćelije u direktnom prostoru je

$$V_0 = 4a^2c \quad (\text{B.2})$$

Vektori recipročne rešetke se dobijaju iz relacija

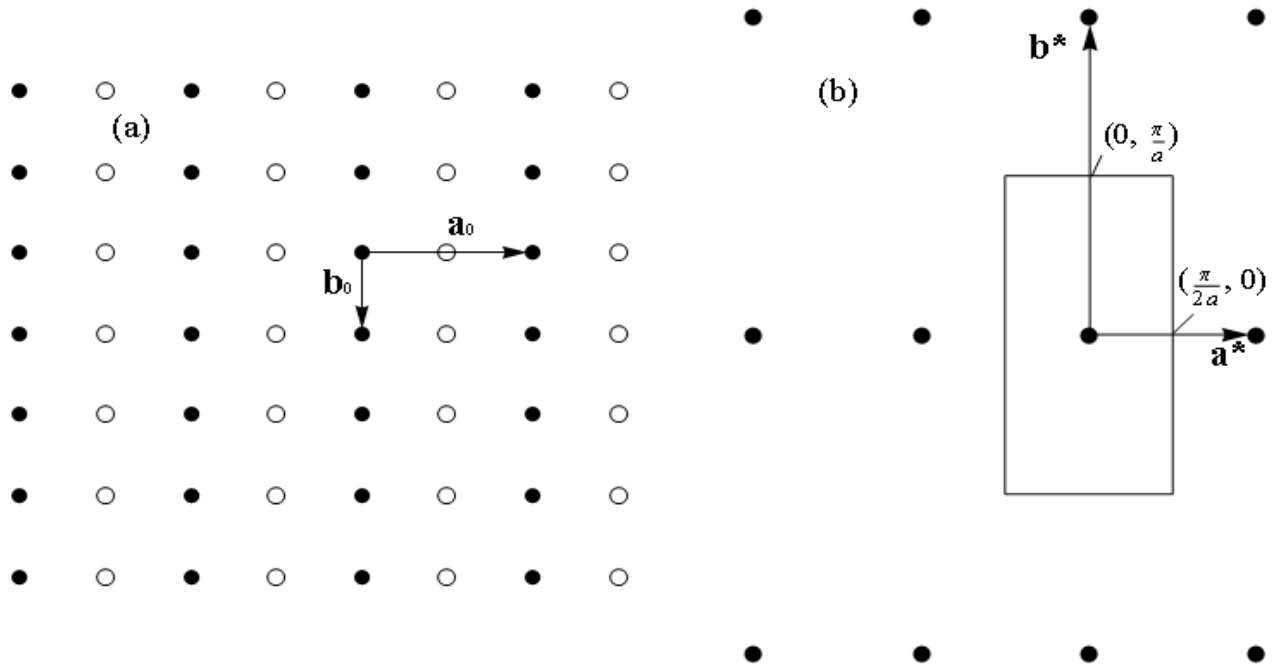
$$\vec{a}^* = 2\pi \frac{\vec{b}_0 \times \vec{c}_0}{V_0}, \vec{b}^* = 2\pi \frac{\vec{c}_0 \times \vec{a}_0}{V_0}, \vec{c}^* = 2\pi \frac{\vec{a}_0 \times \vec{b}_0}{V_0} \quad (\text{B.3})$$

Posle elementarnog računa ove relacije se svode na

$$\vec{a}^* = \frac{\pi}{a}\vec{e}_x, \vec{b}^* = \frac{2\pi}{a}\vec{e}_y, \vec{c}^* = \frac{\pi}{c}\vec{e}_z \quad (\text{B.4})$$

Sad možemo odrediti I Brilluonovu zonu. Koristeći pravilo o konstrukciji Vigner-Zajcove ćelije (vidi primer na Slici 13b)), lako nalazimo granice I Brilluonove zone:

$$k_x = \left(-\frac{\pi}{2a}, \frac{\pi}{2a}\right), k_y = \left(-\frac{\pi}{a}, \frac{\pi}{a}\right), k_z = \left(-\frac{\pi}{2c}, \frac{\pi}{2c}\right) \quad (\text{B.5})$$



Slika 13: Pravougaona rešetka u direktnom prostoru (a) i odgovarajuća I Brillouenova zona, odnosno Vigner-Zajcova ćelija u recipročnom prostoru (b). a^* i b^* su jedinični vektori recipročne rešetke.

Koristimo pravilo o prelasku sa sume na integral, gde se integracija vrši po I Brillouenovoj zoni:

$$\frac{1}{N} \sum_k (\dots) \rightarrow \frac{4ac^2}{(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{2a}}^{\frac{\pi}{2a}} dk_x \int_{-\frac{\pi}{a}}^{\frac{\pi}{a}} dk_y \int_{-\frac{\pi}{2c}}^{\frac{\pi}{2c}} dk_z (\dots) = I \quad (\text{B.6})$$

Uvedeći nove promenljive integracije

$$x = ak_x, \quad y = ak_y, \quad z = ck_z \quad (\text{B.7})$$

gornji izraz svodimo na

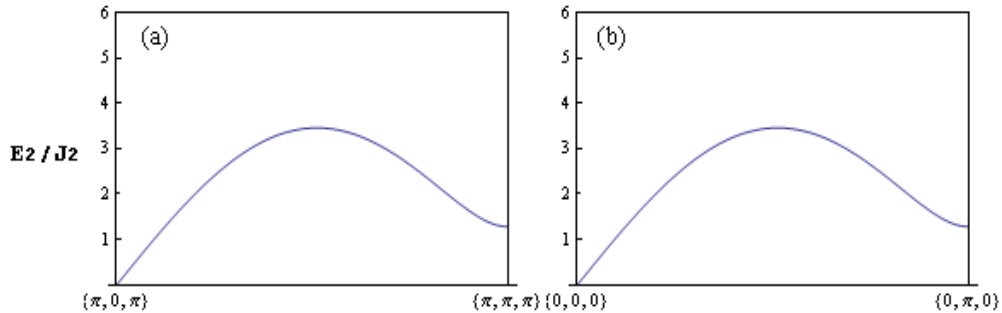
$$I = \frac{4}{(2\pi)^3} \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dx \int_{-\pi}^{\pi} dy \int_{-\frac{\pi}{2}}^{\frac{\pi}{2}} dz (\dots) \quad (\text{B.8})$$

Konačno, iz parnosti kosinusne funkcije je jasno da su podintegralne funkcije koje se javljaju u radu (videti jednačinu (2.57), na primer), parne funkcije promenljivih x, y i z , pa integral I postaje

$$I = \frac{4}{\pi^3} \int_0^{\frac{\pi}{2}} dx \int_0^{\pi} dy \int_0^{\frac{\pi}{2}} dz (\dots) \quad (\text{B.9})$$

Pažljivijim posmatranjem Slike 5 i drugih koje prikazuju disperziju, može se uočiti da je na njima prikazana i disperzija koja 'izlazi' iz I Brillouenove zone, tj. uzimane su i vrednosti promenljivih x, y, z izvan intervala definisanih relacijom (B.5). Za krivu u intervalu $(\pi, 0, \pi)$ –

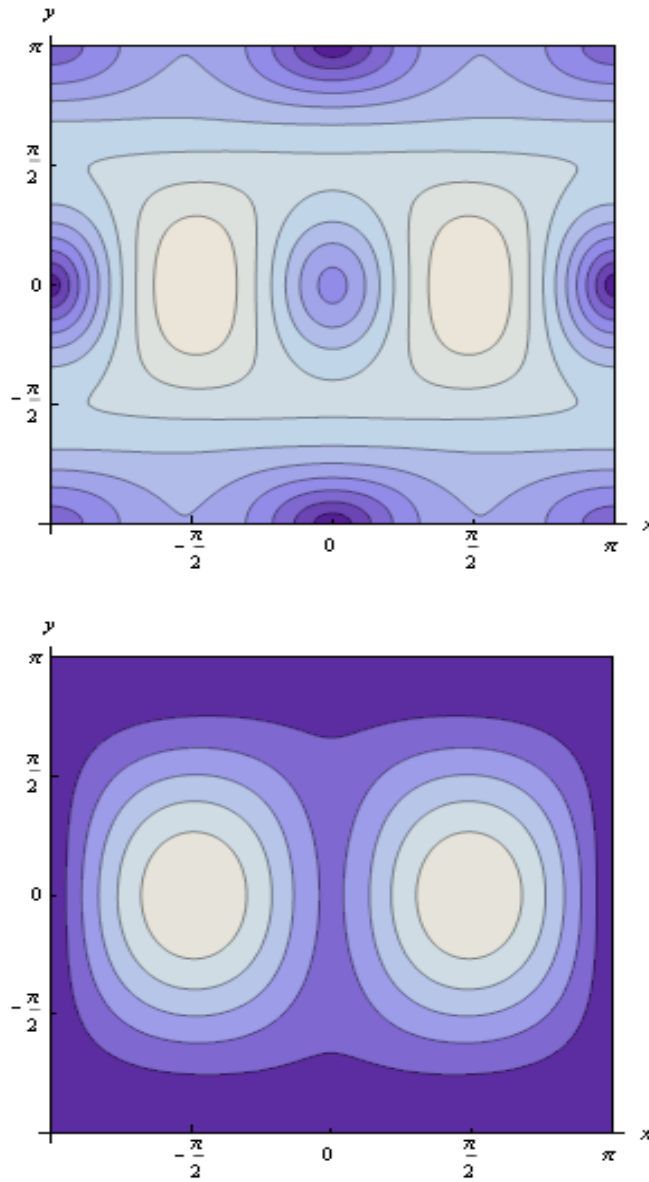
$(\pi, 2\pi, \pi)$ ovo nije problematično jer sve informacije koje ova kriva pruža se mogu dobiti i bez izlaženja izvan I Brillueneve zone. Naime, kriva u intervalu $(\pi, 0, \pi) - (\pi, \pi, \pi)$ je identična sa krivom u intervalu $(0, 0, 0) - (0, \pi, 0)$, što je pokazano na Slici 14. Drugi deo intervala $(\pi, 0, \pi) - (\pi, 2\pi, \pi)$ se zatim dobija prostim preslikavanjem prvog dela, kao predmet i lik u ogledalu (videti, na primer Sliku 9b)). Nažalost, ovakav argument se ne može primeniti za



Slika 14: Disperzija u intervalu $(\pi, 0, \pi) - (\pi, \pi, \pi)$ (a), i u intervalu $(0, 0, 0) - (0, \pi, 0)$ (b). Nacrtane su krive za vrednost parametara $X = 0.7$ i $Y = 0.1$.

disperziju u intervalima $(0, 0, 0) - (\pi, 0, 0)$ i $(\pi, 0, 0) - (\pi, 0, \pi)$. Čini se da ovi intervali sadrže informacije koje se ne mogu u potpunosti dobiti pri ostajanju unutar I Brillueneve zone. Za sad ne postoji zadovoljavajući odgovor na ovaj problem. U originalnom radu²⁰ problem se ne javlja jer je Brillueneva zona drugačije definisana, uzeto je da x, y i z mogu uzimati vrednosti od $-\pi$ do π . U tom radu je pri konstruisanju elementarne ćelije u direktnom prostoru verovatno napravljen izbor $\vec{b}_0 = 2a\vec{e}_y$, zbog antiferomagnetnog kuplovanja između susednih spinova. Međutim, jasno je da je u fazi sa trakastim spinskim uređenjem poredak duž y ose efektivno feromagnetan i da se cela kristalna rešetka može rekonstruisati sa izborom $\vec{b}_0 = a\vec{e}_y$. Zbog toga se definicija Brillueneve zone koja je korišćena u osnovnoj referenci ne čini sasvim opravdanom.

Kao ilustraciju u prilog našem izboru za Brilluenuvu zonu, na Slici 15 dajemo konturnu verziju grafika sa Slike 7 (disperzija u ravni xy , za dve vrednosti parametra X). Smatramo da ovi grafici ukazuju na mogućnost da se čitava disperzija ipak može dobiti pri ostajanju unutar granica definisanih relacijom (B. 5). Čvrsto verujemo u ispravnost našeg izbora Brillueneve zone i kao dodatni argument pozivamo se na rad [35], u kom je napravljen identičan izbor.



Slika 15: Konturni prikaz disperzije u ravni xy za spin 1 i parametar $Y = 0.1$. Prikazani su rezultati za vrednost $X = 0.7$ (gore) i za $X = 1.96$ (dole).

Prilog C

Grinove funkcije i spektralna teorema

C.1 Neravnotežne srednje vrednosti operatora

Ovaj Prilog je posvećen Grinovim i korelacionim funkcijama i njihovim spektralnim reprezentacijama. Ovdje ćemo eksplicitno pisati konstante \hbar i k_B . Počinjemo razmatranjem kvantnog statističkog ansambla sistema opisanog Hamiltonijanom \hat{H} koji ne zavisi od vremena. Zanima nas kako ovaj sistem reaguje na uključjenje spoljašnje vremenski zavisne perturbacije \hat{H}'_t . Najopštiji oblik u kome se može zadati vremenski zavisni Hamiltonijan je sledeći:

$$\hat{\mathcal{H}}(t) = \begin{cases} \hat{H} & \text{za } t \leq t_0 \\ \hat{H} + \hat{H}'_t & \text{za } t > t_0 \end{cases} \quad (\text{C.1})$$

Trenutak t_0 predstavlja moment uključenja (isključenja) interakcije. Želimo da saznamo kako uključjenje vremenski zavisne smetnje utiče na računanje srednjih vrednosti operatora. Posmatramo operator \hat{A} pridružen nekoj dinamičkoj promenljivoj i smatramo da je reakcija sistema linearna, tj. smatramo da je odziv sistema proporcionalan smetnji, što je opravdana aproksimacija u slučaju slabih smetnji. Može se lako pokazati da je u aproksimaciji linearnog odziva neravnotežna srednja vrednost operatora $\langle \hat{A}(t) \rangle_t$ data sa

$$\langle \hat{A}(t) \rangle_t = \langle \hat{A}(t) \rangle_0 + \frac{1}{i\hbar} \int_{t_0}^t dt' \theta(t-t') \langle \hat{A}(t) \hat{W}(t') - \hat{W}(t') \hat{A}(t) \rangle_0 \quad (\text{C.2})$$

$\hat{\mathcal{A}}(t)$ i $\hat{W}(t)$ su operatori u interakcionoj slici:

$$\hat{\mathcal{A}}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A}(t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad \hat{W}(t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} \hat{H}'_t e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} (t-t_0)} \quad (\text{C.3})$$

$\langle \dots \rangle_0$ označava ravnotežnu srednju vrednost:

$$\langle \dots \rangle_0 = Tr(\dots \hat{\rho}_0), \quad \hat{\rho}_0 = e^{\frac{F-\hat{H}}{\theta}}, \quad \theta = k_B T \quad (\text{C.4})$$

$\hat{\rho}_0$ je ravnotežni statistički operator velikog kanoničkog ansambla, a F je slobodna energija sistema. Relacija (C.2) pokazuje da se neravnotežna srednja vrednost operatora može naći uz pomoć ravnotežnih srednjih vrednosti. Ako se ograničimo na mehaničke perturbacije sistema

(sličan aparat postoji za termičke perturbacije), interakcija se u većini praktičnih slučajeva može zapisati u obliku:

$$\hat{H}'_t = \int dx' \hat{B}(x', t) \varepsilon(x', t) \quad (\text{C.5})$$

$\hat{B}(x', t)$ je operator dinamičke promenljive B , a funkcije $\varepsilon(x', t)$ su tzv. C-brojevi. Na primer, interakciju elektromagnetnog polja čiji je vektorski potencijal \vec{A} sa spoljašnjim strujama gustine \vec{j} možemo prikazati na sledeći način:

$$\hat{H}'_t = -\frac{1}{c} \int d^3\vec{r} \hat{A}(\vec{r}, t) \vec{j}(\vec{r}, t) \quad (\text{C.6})$$

Vektorski potencijal predstavljen je operatorom $\hat{A}(\vec{r}, t)$ koji se obično izražava pomoću kreacionih i anihilacionih fotonских operatora, a struje predstavljaju C-brojeve. Obzirom na oblik interakcije (C.5), operator $\hat{W}(t')$ ima oblik

$$\hat{W}(t') = \int dx' \hat{B}(x', t') \varepsilon(x', t') , \quad \hat{B} = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t'} \hat{B}(x', t) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t'} \quad (\text{C.7})$$

Jednačina (C.2) može da se napiše u sledećoj formi:

$$\langle \hat{A}(t) \rangle_t - \langle \hat{A}(t) \rangle_0 = \frac{1}{i\hbar} \int dx' \int_{t_0}^t dt' \varepsilon(x', t') G^R(x, x'; t, t') \quad (\text{C.8})$$

Ovde smo uveli veličinu

$$G^R(x, x'; t, t') = \theta(t - t') \langle \hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') - \hat{B}(x', t') \hat{A}(x, t) \rangle_0 = \langle \langle \hat{A}(x, t) | \hat{B}(x', t') \rangle \rangle^R \quad (\text{C.9})$$

$\theta(t - t')$ je dobro poznata Hevisajdova step funkcija:

$$\theta(t - t') = \begin{cases} 1 & \text{za } t > t' \\ 0 & \text{za } t < t' \end{cases} \quad (\text{C.10})$$

Veličina $G^R(x, x'; t, t')$ se naziva dvovremenska, temperaturska retardovana Grinova funkcija (ili samo Grinova funkcija - GF). Pridev 'retardovana' potiče od uslova vremenske retardacije koja sledi iz definicije teta funkcije (C.10). Sa pridevom 'temperaturska' želimo da naglasimo razliku između Grinovih funkcija u statističkoj fizici (koje mi koristimo) od onih koje se koriste u kvantnoj teoriji polja. U teoriji polja usrednjavanje se vrši po vakuumu (najnižem kvantnom stanju sistema), a videli smo da se u statističkoj fizici usrednjavanje vrši po kanoničkom ansamblu. Stoga Grinove funkcije statističke fizike, pored prostornih i vremenskih koordinata, zavise i od temperature. U naziv Grinove funkcije (C.9) mogli bi dodati i pridev 'komutatorska', jer u njoj očigledno figurira komutator operatora, ali ovo se obično ne naglašava. Postoje i druge vrste Grinovih funkcija, o čemu ćemo više reći u narednom odeljku.

C.2 Retardovane, avansovane i kauzalne Grinove funkcije

U statističkoj fizici, kao i u kvantnoj teoriji polja, razmatraju se retardovane (r), avansovane (a) i kauzalne (c) Grinove funkcije:

$$G^{(r)}(x, x'; t, t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(r)} = \theta(t - t') \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle_0 \quad (\text{C.11})$$

$$G^{(a)}(x, x'; t, t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(a)} = \theta(t' - t) \langle [\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} \rangle_0 \quad (\text{C.12})$$

$$G^{(c)}(x, x'; t, t') = \langle \langle \hat{\mathcal{A}}(x, t) | \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle \rangle^{(c)} = \langle T_{\eta} \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle_0 \quad (\text{C.13})$$

Ovde su korišćene oznake:

$$[\hat{\mathcal{A}}(x, t), \hat{\mathcal{B}}(x', t')]_{\eta} = \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') - \eta \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t), \quad \eta = \pm 1 \quad (\text{C.14})$$

$$T_{\eta} \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') = \theta(t - t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') + \eta \theta(t' - t) \hat{\mathcal{B}}(x', t') \hat{\mathcal{A}}(x, t) \quad (\text{C.15})$$

Vrednost $\eta = +1$ odgovara komutatoru, a vrednost $\eta = -1$ odgovara antikomutatoru. To da li ćemo koristiti komutator ili antikomutator zavisi od konkretnog problema. Obično se koristi komutator ako su $\hat{\mathcal{A}}$ i $\hat{\mathcal{B}}$ Boze-operatori, odnosno antikomutator ako su Fermi-operatori. Nadalje ćemo izostaviti indeks '0' kojim smo obeležavali ravnotežne srednje vrednosti. Dakle, u daljem izlaganju se podrazumeva

$$\langle \dots \rangle = \langle \dots \rangle_0 = Q^{-1} Tr(\dots e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}), \quad Q = Tr(e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}) = e^{-\frac{\phi}{\theta}} \quad (\text{C.16})$$

ϕ je termodinamički potencijal. Operatori $\hat{\mathcal{A}}$ i $\hat{\mathcal{B}}$ su dati u Hajzenbergovoj slici:

$$\hat{\mathcal{A}}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{\mathcal{A}}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t}, \quad \hat{\mathcal{B}}(x, t) = e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{\mathcal{B}}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \quad (\text{C.17})$$

Prostorna koordinata x može biti kontinualna ili diskretna. Već smo ranije rekli da u slučaju homogene sredine (kristala) Grinova funkcija zavisi od razlike prostornih koordinata, a ne od svake prostorne koordinate posebno:

$$G^i(x, x'; t, t') \rightarrow G^i(x - x'; t, t'), \quad i = r, a, c \quad (\text{C.18})$$

Dokaz ove tvrdnje je vrlo jednostavan. Poznato je da je u kvantnoj mehanici impuls generator translacije, odnosno da unitarni operator koji vrši translaciju za proizvoljan iznos Δ_x u x pravcu može da se napiše u obliku:

$$U(\Delta_x) = e^{-ip_x \cdot \Delta_x} \quad (\text{C.19})$$

Znamo kako ovaj unitarni operator deluje na talasne funkcije i druge operatore:

$$U(x') \psi(x) = \psi(x - x'), \quad U(x') \hat{O}(x) U^{\dagger}(x') = \hat{O}(x - x') \quad (\text{C.20})$$

Pošto u kristalima postoji translatorna simetrija, operator translacije mora da komutira sa Hamiltonijanom:

$$[U(x'), \hat{H}] = 0 \quad (\text{C.21})$$

Posmatrajmo sada trag koji se javlja u nekoj Grinovoj funkciji $G(x, x'; t)$:

$$\begin{aligned}
Tr(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{A}}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{B}}(x')) &= Tr(U^\dagger(x')U(x')e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{A}}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}U^\dagger(x')U(x')\hat{\mathcal{B}}(x')) = \\
&= Tr(U(x')e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{A}}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}U^\dagger(x')U(x')\hat{\mathcal{B}}(x')U^\dagger(x')) = \quad (C.22) \\
&= Tr(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}U(x')\hat{\mathcal{A}}(x)U^\dagger(x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}U(x')\hat{\mathcal{B}}(x')U^\dagger(x')) = \\
&= Tr(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{A}}(x-x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{B}}(0)) = f(x-x')
\end{aligned}$$

Pri ovom izvodjenju koristili smo simetričnost traga:

$$Tr(\hat{A}\hat{B}) = Tr(\hat{B}\hat{A}) \quad (C.23)$$

Koristili smo i činjenicu da operator translacije komutira sa Hamiltonijanom, a samim tim i sa $e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}$. Dodatno veliko pojednostavljenje sledi ako operatori \hat{A} i \hat{B} ne zavise eksplicitno od vremena, tj. $\partial\hat{A}/\partial t = \partial\hat{B}/\partial t = 0$ (ovo je i pretpostavljeno u (C.17)). Tada Grinova funkcija ne zavisi od momenata vremena t i t' ponaosob, već samo od njihove razlike. Ovo se takodje može vrlo lako dokazati iz definicije srednje vrednosti:

$$\begin{aligned}
\langle \hat{\mathcal{A}}(x, t)\hat{\mathcal{B}}(x', t') \rangle &= Tr\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{B}(x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{\rho}_0\right) = \\
&= \frac{1}{Q}Tr\left(e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{B}(x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}\right) = \\
&= \frac{1}{Q}Tr\left(e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{B}(x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\right) = \quad (C.24) \\
&= \frac{1}{Q}Tr\left(e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{A}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{B}(x')\right) = \\
&= \frac{1}{Q}Tr\left(e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')}\hat{A}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}(t-t')}\hat{B}(x')\right) = f(t-t')
\end{aligned}$$

Opet smo koristili simetričnost traga, kao i činjenicu da operatori $e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}$ i $e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}$ komutiraju. Rezime bi bio da u slučaju homogenog prostora (uz ignorisanje efekta krajeva) i operatora koji ne zavise eksplicitno od vremena Grinova funkcija zavisi od razlika prostornih, odnosno vremenskih koordinata:

$$G^i(x, x'; t, t') \rightarrow G^i(x - x'; t - t') , \quad i = r, a, c \quad (C.25)$$

U daljem izlaganju ćemo se ograničiti na dvovremenske Grinove funkcije (mogu se definisati i viševremenske GF). Dvovremenske GF su pogodne jer je za njih moguće koristiti proste spektralne razvoje koji jako olakšavaju rešavanje jednačina za Grinove funkcije.

C.3 Jednačine kretanja za Grinove funkcije

Iz definicija Grinovih funkcija (C.11)-(C.13) lako možemo naći jednačine kretanja za iste. Koristićemo se dobro poznatim identitetom

$$\frac{\partial}{\partial t}\theta(t-t') = -\frac{\partial}{\partial t}\theta(t'-t) = \delta(t-t') \quad (C.26)$$

Imajući na umu ovaj identitet, za jednačine kretanja Grinovih funkcija dobijamo

$$\frac{d}{dt}G^{(j)}(x-x';t-t') = \delta(t-t')\langle[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{B}}(x',t')]\eta\rangle^{(j)} + \theta(t-t')\langle[\frac{d\hat{\mathcal{A}}(x,t)}{dt},\hat{\mathcal{B}}(x',t')]\eta\rangle^{(j)} \quad (\text{C.27})$$

$\delta(t-t')$ daje doprinos samo za $t=t'$, pa prvi sabirak na desnoj strani gornje jednačine postaje:

$$\delta(t-t')\langle[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{B}}(x',t')]\eta\rangle^{(j)} \rightarrow \delta(t-t')\langle[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{B}}(x',t)]\eta\rangle^{(j)} \quad (\text{C.28})$$

Već smo pokazali da u slučaju $\partial\hat{A}/\partial t = \partial\hat{B}/\partial t = 0$ srednje vrednosti zavise od $t-t'$, pa je jasno da $\langle[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{B}}(x',t)]\eta\rangle^{(j)}$ ne zavisi od vremena. Zato možemo pisati:

$$\langle[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{B}}(x',t)]\eta\rangle^{(j)} = Q(x-x') \quad (\text{C.29})$$

Još je ostalo da iskoristimo Hajzenbergovu jednačinu kretanja za operator $\hat{\mathcal{A}}(x,t)$:

$$i\hbar\frac{d\hat{\mathcal{A}}(x,t)}{dt} = [\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{H}}(t)] \quad (\text{C.30})$$

Ova jednačina kretanja za operatore u Hajzenbergovoj slici se može izvesti iz same definicije (C.17). Jednačinu koristimo u relaciji (C.27), čime dobijamo

$$i\hbar\frac{d}{dt}G^{(j)}(x-x';t-t') = i\hbar\delta(t-t')Q(x-x') + \theta(t-t')\langle[[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{H}}(t)],\hat{\mathcal{B}}(x',t')]\eta\rangle^{(j)} \quad (\text{C.31})$$

Poslednji član u dobijenom izrazu predstavlja neku novu Grinovu funkciju koju ćemo posebno označiti:

$$\Gamma^{(j)}(x-x';t-t') = \theta(t-t')\langle[[\hat{\mathcal{A}}(x,t),\hat{\mathcal{H}}(t)],\hat{\mathcal{B}}(x',t')]\eta\rangle^{(j)} \quad (\text{C.32})$$

$\Gamma^{(j)}$ se obično naziva viša Grinova funkcija, jer u praksi sadrži srednje vrednosti proizvoda većeg broja operatora nego što ih sadrži polazna Grinova funkcija $G^{(j)}$. Konačno, jednačina kretanja za $G^{(j)}$ dobija oblik:

$$i\hbar\frac{d}{dt}G^{(j)}(x-x';t-t') = i\hbar\delta(t-t')Q(x-x') + \Gamma^{(j)}(x-x';t-t') \quad (\text{C.33})$$

Dalje se na isti način može dobiti jednačina kretanja za $\Gamma^{(j)}$ u kojoj bi se pojavile Grinove funkcije još višeg reda, itd. Opisanom procedurom dobija se beskonačan lanac jednačina za određivanje funkcije $G^{(j)}$. Očigledno je da se ovakav beskonačan lanac jednačina ne može u praksi iskoristiti za nalaženje polazne Grinove funkcije. Lanac jednačina se stoga mora preseći na nekom mestu, i to tako što se podesnom aproksimacijom izrazi viša Grinova funkcija preko niže Grinove funkcije. Ovaj način 'presecanja' lanca naziva se dekuplovanje i u raznim konkretnim problemima vrši se na različite načine. Opšti recept za dekuplovanje ne postoji, pa je odabir određenog metoda dekuplovanja pitanje iskustva teoretičara.

Treba istaći da je lanac jednačina tipa (C.33) isti za sve Grinove funkcije ($G^{(r)}$, $G^{(a)}$ i $G^{(c)}$) ako su one konstruisane od istih operatora \hat{A} i \hat{B} . Ove jednačine kretanja se moraju dopuniti graničnim uslovima, što ćemo videti kasnije, uz pomoć spektralnih teorema. Izvršimo sada Furije transformaciju vreme-frekvencija Grinove funkcije:

$$G^{(j)}(x-x';t-t') = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G^{(j)}(x-x';\omega) \quad (\text{C.34})$$

$$G^{(j)}(x-x';\omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{i\omega(t-t')} G^{(j)}(x-x';t-t') \quad (\text{C.35})$$

Uz pomoć očigledne relacije:

$$\frac{d}{dt}G^{(j)}(x-x';t-t') = \frac{d}{dt} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} G^{(j)}(x-x';\omega) = -i \int_{-\infty}^{\infty} d\omega \omega e^{-i\omega(t-t')} G^{(j)}(x-x';\omega) \quad (\text{C.36})$$

i integralne reprezentacije delta funkcije:

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \quad (\text{C.37})$$

lako je videti da u Furije prostoru lanac jednačina (C.33) poprima oblik (izostavljamo prostorne indekse x i x'):

$$\hbar\omega \langle\langle \hat{\mathcal{A}}|\hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle_{\omega}^{(j)} = \frac{i\hbar}{2\pi} \langle[\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{B}}]_{\eta}\rangle + \langle\langle [\hat{\mathcal{A}}, \hat{\mathcal{H}}]|\hat{\mathcal{B}} \rangle\rangle_{\omega}^{(j)} \quad (\text{C.38})$$

Ovo je upravo jednačina kretanja (2.7) koju smo koristili u radu (sa $\hbar = 1$).

C.4 Spektralna teorema

Da bismo mogli više naučiti o Grinovim funkcijama, moramo analizirati korelacione funkcije (korelatore) koji ulaze u sastav Grinovih funkcija:

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathcal{A}}\hat{\mathcal{B}}}(x-x';t-t') = \langle\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')\rangle = \text{Tr}(\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\rho}_0) \quad (\text{C.39})$$

$$\mathcal{J}_{\hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}}(x-x';t-t') = \langle\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)\rangle = \text{Tr}(\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\rho}_0) \quad (\text{C.40})$$

Neka su $|k\rangle$ i E_k svojstvena stanja i svojstvene vrednosti Hamiltonijana razmatranog sistema:

$$\hat{H}|k\rangle = E_k|k\rangle \quad (\text{C.41})$$

Neka je $F(\hat{H})$ funkcija Hamiltonijana koja se može razviti u Tejlorov red po \hat{H} . Dirakova formula nam kaže kako ova funkcija deluje na svojstvena stanja:

$$F(\hat{H})|k\rangle = F(E_k)|k\rangle \quad (\text{C.42})$$

Koristićemo se i svojstvom kompletnosti svojstvenih stanja:

$$\hat{1} = \sum_k |k\rangle\langle k| \quad (\text{C.43})$$

Sada možemo transformisati korelacionu funkciju $\mathcal{J}_{\hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\hat{\mathcal{B}}\hat{\mathcal{A}}}(x-x';t-t') &= \text{Tr}(\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{\mathcal{A}}(x,t)\hat{\rho}_0) = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_k \langle k|\hat{\mathcal{B}}(x',t')\hat{1}\hat{\mathcal{A}}(x,t)e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}|k\rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k|\hat{\mathcal{B}}(x',t')|l\rangle\langle l|\hat{\mathcal{A}}(x,t)e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}|k\rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}\hat{\mathcal{B}}(x')e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t'}|l\rangle\langle l|e^{\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}\hat{\mathcal{A}}(x)e^{-\frac{i}{\hbar}\hat{H}t}e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}}|k\rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k|\hat{\mathcal{B}}(x')|l\rangle\langle l|\hat{\mathcal{A}}(x)|k\rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} e^{-i\frac{E_k-E_l}{\hbar}\tau}, \quad \tau = t-t' \end{aligned} \quad (\text{C.44})$$

U gornjem izvodjenju koristili smo Dirakovu formulu (C.42). Krajnji izraz dobijen u (C.44) množimo sa $e^{i\omega\tau}$ i sve integralimo po τ :

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \tau) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar})\tau} \quad (C.45)$$

Uvedimo Furije-lik korelacione funkcije u odnosu na transformaciju vreme-frekvencija:

$$\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega) = \frac{1}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i\omega\tau} \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \tau) \quad (C.46)$$

Još jednom se podsetimo integralne reprezentacije delta funkcije:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar})\tau} = 2\pi \delta\left(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar}\right) \quad (C.47)$$

Vidimo da nam jednačina (C.45) daje izraz za Furije-lik korelacione funkcije:

$$\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} \delta\left(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar}\right) \quad (C.48)$$

Iz poslednje relacije vidimo da $\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega)$ ima singularitet na frekvenciji $\frac{E_k - E_l}{\hbar}$, zbog prisustva delta funkcije. Razlika energija $E_k - E_l$ predstavlja energiju pobudjenja sistema pri prelasku iz kvantnog stanja $|l\rangle$ u kvantno stanje $|k\rangle$.

Sličan postupak možemo sprovesti za korelacionu funkciju $\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}$:

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; t - t') &= Tr(\hat{A}(x, t) \hat{B}(x', t') \hat{\rho}_0) = \\ &= Tr(\hat{B}(x', t') \hat{\rho}_0 \hat{A}(x, t)) = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_k \langle k | \hat{B}(x', t') e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} \hat{A}(x, t) | k \rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x', t') e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} | l \rangle \langle l | \hat{A}(x, t) | k \rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t'} \hat{B}(x') e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t'} e^{-\frac{\hat{H}}{\theta}} | l \rangle \langle l | e^{\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} \hat{A}(x) e^{-\frac{i}{\hbar} \hat{H} t} | k \rangle = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_l}{\theta}} e^{-i \frac{E_k - E_l}{\hbar} \tau} = \\ &= \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} e^{\frac{E_k - E_l}{\theta}} e^{-i \frac{E_k - E_l}{\hbar} \tau}, \quad \tau = t - t' \end{aligned} \quad (C.49)$$

U ovom izvodjenju je pored Dirakove formule (C.42) korišćena i osobina simetrije traga (C.23). Nadalje je postupak identičan onome koji smo sreli kod korelacione funkcije $\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}$. Množimo krajnji izraz u (C.49) sa $e^{i\omega\tau}$ i integralimo dobijenu relaciju po τ , što nam daje:

$$\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \omega) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} e^{\frac{E_k - E_l}{\theta}} \delta\left(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar}\right) \quad (C.50)$$

$\delta\left(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar}\right)$ je različita od nule samo za $E_k - E_l = \hbar\omega$, pa se gornja relacija može pisati i u sledećoj formi:

$$\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \omega) = \frac{1}{Q} \sum_{k,l} \langle k | \hat{B}(x') | l \rangle \langle l | \hat{A}(x) | k \rangle e^{-\frac{E_k}{\theta}} e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} \delta\left(\omega - \frac{E_k - E_l}{\hbar}\right) \quad (\text{C.51})$$

Prisustvo delta funkcije i u ovoj korelacionoj funkciji ukazuje na to da postoji singularitet kada je $\hbar\omega$ jednako energiji pobudjenja $E_k - E_l$. Ova činjenica bitno definiše fizički sadržaj Grinovih funkcija. Pošto korelacione funkcije $\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}$ i $\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}$ ulaze u sastav Grinovih funkcija (C.11)-(C.13) jasno je i da će Furije lik Grinove funkcije $G^{(j)}(x - x'; \omega)$ takodje imati singularitet u tački u kojoj važi $\hbar\omega = E_k - E_l$. Otuda pol Grinove funkcije u kompleksnoj ω ravni predstavlja energiju elementarnih pobudjenja u sistemu, odnosno zakon disperzije elementarnih pobudjenja.

Naglasimo još da se veličine $\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \omega)$ i $\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega)$ nazivaju spektralne intenzivnosti ili spektralne funkcije date korelacione funkcije. Takodje, na osnovu relacija (C.48) i (C.51) zaključujemo da važi

$$\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \omega) = e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega) \quad (\text{C.52})$$

Ova veza će se uskoro pokazati vrlo korisnom. Sada možemo uspostaviti vezu izmedju Furije-komponenta Grinove funkcije i odgovarajućih komponenata za korelacione funkcije. U tu svrhu koristićemo se relacijama (C.34) i (C.35). Takodje ćemo koristiti dobro poznatu integralnu reprezentaciju za Hevisajdovu step funkciju:

$$\theta(\tau) = -\frac{i}{2\pi} \oint_L d\omega \frac{e^{-i\omega\tau}}{\omega + i\varepsilon}, \quad \varepsilon \rightarrow 0^+ \quad (\text{C.53})$$

Kontura L se za $\tau > 0$ zatvara u donjoj, a za $\tau < 0$ u gornjoj kompleksnoj poluravni. Činjenica da gornji integral zaista predstavlja funkciju definisanu relacijom (C.10) se može lako proveriti upotrebom teoreme o reziduumu. Za primer dobijanja spektralne reprezentacije Grinovih funkcija koristićemo se retardovanom Grinovom funkcijom, čiju smo definiciju već dali:

$$G^{(r)}(x - x'; \tau) = \theta(\tau) (\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \tau) - \eta \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \tau)) \quad (\text{C.54})$$

Vršimo Furije transformaciju Grinove funkcije i korelacionih funkcija:

$$G^{(r)}(x - x'; \tau) = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' e^{-i\omega''\tau} G^{(r)}(x - x'; \omega'') \quad (\text{C.55})$$

$$\begin{aligned} \mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \tau) - \eta \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \tau) &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'\tau} (\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x - x'; \omega') - \eta \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega')) = \\ &= \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' e^{-i\omega'\tau} (e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega') \end{aligned} \quad (\text{C.56})$$

U izvodjenju smo upotreбили vezu (C.52). Koristeći navedene Furije transformacije i integralnu reprezentaciju Hevisajdove funkcije (C.53), dobijamo relaciju:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' e^{-i\omega''\tau} G^{(r)}(x - x'; \omega'') = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' d\omega'' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x - x'; \omega')}{\omega'' + i\varepsilon} e^{-i(\omega' + \omega'')\tau} \quad (\text{C.57})$$

Jednačinu (C.58) množimo sa $e^{i\omega\tau}$ i rezultat množenja integralimo po τ od $-\infty$ do ∞ . Time dobijamo:

$$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega'' G^{(r)}(x-x'; \omega'') \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega-\omega'')\tau}}_{2\pi\delta(\omega-\omega'')} = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' d\omega'' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega')}{\omega'' + i\varepsilon} \underbrace{\int_{-\infty}^{\infty} d\tau e^{i(\omega-\omega'-\omega'')\tau}}_{2\pi\delta(\omega-\omega'-\omega'')} \quad (\text{C.58})$$

Koristeći osobinu delta funkcije da ukida integral gornji izraz svodimo na:

$$G^{(r)}(x-x'; \omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega')}{\omega - \omega' + i\varepsilon} \quad (\text{C.59})$$

Slično se za avansovanu Grinovu funkciju dobija:

$$G^{(a)}(x-x'; \omega) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega')}{\omega - \omega' - i\varepsilon} \quad (\text{C.60})$$

U izrazima (C.60) i (C.61) veličina ω je realna. Može se pokazati da se ove dve funkcije mogu analitički produžiti u kompleksnu ravan ω . Ako se uzme da je ω kompleksna promenljiva, s obzirom da je spektralna intenzivnost ista u (C.60) i (C.61) i da nema singulariteta na realnoj osi, mogu se dve formule objediniti u jednu jedinstvenu analitičku funkciju kompleksne promenljive $\omega \rightarrow z$:

$$G(x-x'; z) = \frac{i}{2\pi} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega')}{z - \omega'} = \begin{cases} G^{(r)}(x-x'; z) & \text{Im}z > 0 \\ G^{(a)}(x-x'; z) & \text{Im}z < 0 \end{cases} \quad (\text{C.61})$$

Formule (C.60)-(C.62) predstavljaju spektralne reprezentacije Grinovih funkcija. Funkcija $G^{(r)}(x-x'; z)$ je analitička u gornjoj, a funkcija $G^{(a)}(x-x'; z)$ u donjoj kompleksnoj poluravni. Njih možemo razmatrati kao jedinstvenu funkciju $G(x-x'; z)$ koja je analitička u celoj z ravni, osim eventualno na konturi L , i koja na realnoj osi ima singularitete (polove). Zbog toga nadalje ispuštamo indekse r, a .

Moguće je naći i spektralnu reprezentaciju za kauzalne Grinove funkcije, ali ona je znatno komplikovanija i nećemo je ovde pisati. Kauzalne Grinove funkcije definisane su samo na realnoj osi i pri $\theta \neq 0$ ne mogu biti produžene u kompleksnu ravan. To znatno otežava njihovu primenu i nadalje nećemo razmatrati ovu klasu Grinovih funkcija.

Ako je poznata Grinova funkcija $G(x-x'; z)$, tada se pomoću nje može odrediti spektralna intenzivnost $\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}$. Koristimo Dirakov simbolički identitet (2.42), uz pomoć kojeg izraze za Furije transforme Grinovih funkcija svodimo na ($z \rightarrow \omega$):

$$G(x-x'; \omega + i\varepsilon) = \frac{i}{2\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega')}{\omega - \omega'} + \frac{1}{2} (e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega) \quad (\text{C.62})$$

$$G(x-x'; \omega - i\varepsilon) = \frac{i}{2\pi} \mathcal{P} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega' \frac{(e^{\frac{\hbar\omega'}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega')}{\omega - \omega'} - \frac{1}{2} (e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - \eta) \mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x'; \omega) \quad (\text{C.63})$$

Oduzimanjem poslednje dve relacije dobijamo:

$$\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x';\omega) = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \frac{G(x-x';\omega+i\varepsilon) - G(x-x';\omega-i\varepsilon)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - \eta} \quad (\text{C.64})$$

Množenjem dobijene relacije sa $e^{-i\omega(t-t')}$ i integracijom po ω dobijamo:

$$\mathcal{J}_{\hat{B}\hat{A}}(x-x';t-t') = \langle \hat{B}(x',t')\hat{A}(x,t) \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{G(x-x';\omega+i\varepsilon) - G(x-x';\omega-i\varepsilon)}{e^{\frac{\hbar\omega}{\theta}} - \eta} \quad (\text{C.65})$$

Ovo je relacija (2.5) (sa $\eta = 1$ i $\hbar = 1$). Sličnim postupkom se može dobiti odgovarajući izraz za $\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}$:

$$\mathcal{J}_{\hat{A}\hat{B}}(x-x';t-t') = \langle \hat{A}(x,t)\hat{B}(x',t') \rangle = \lim_{\varepsilon \rightarrow 0^+} \int_{-\infty}^{\infty} d\omega e^{-i\omega(t-t')} \frac{G(x-x';\omega+i\varepsilon) - G(x-x';\omega-i\varepsilon)}{1 - \eta e^{-\frac{\hbar\omega}{\theta}}} \quad (\text{C.66})$$

Na osnovu izraza (C.67) i (C.68) zaključujemo da nam poznavanje Grinove funkcije daje mogućnost za izračunavanje srednjih vrednosti proizvoda operatora koji deluju u različitim trenucima vremena. Pošto polovi Grinove funkcije daju energiju elementarnih eksitacija u sistemu, preko kojih se izražavaju srednje vrednosti, metod dvovremenskih Grinovih funkcija je zatvoren (self consistent) metod, u smislu da može da pruži kompletnu statističku informaciju o sistemu bez pribegavanja drugim metodama. Za kraj napomenimo još samo da iako smo mi Grinove funkcije uveli preko posmatranja neravnotežnih srednjih vrednosti operatora, ovaj metod se sa jednakom efikasnošću koristi i u ravnotežnoj statističkoj fizici. Štaviše, metod Grinovih funkcija se danas i češće koristi u problemima ravnotežne statističke fizike jer su ravnotežni Hamiltonijani obično izuzetno komplikovani pa im se svojstvene vrednosti moraju tražiti perturbativnim ili dijagramskim tehnikama, za šta je opet 'jezik' Grinovih funkcija najpogodniji.

Literatura

- [1] Y. Izyumov, E. Kurmaev, *High-Tc. Superconductors Based on FeAs Compounds*, Springer, 2010
- [2] C. de la Cruz, Q. Huang, J. W. Lynn, J. Li, W. Ratcliff II, J. L. Zarestky, H. A. Mook, G. F. Chen, J. L. Luo, N. L. Wang, P. Dai, *Nat. Lett.* **453** 07057 (2008)
- [3] J. Zhao, D. T. Adroja, D.-X. Yao, R. Bewley, S. Li, X. F. Wang, G. Wu, X. H. Chen, J. Hu, P. Dai, *Nat. Phys.* **5** 555 (2009)
- [4] A. J. Drew, F. L. Pratt, T. Lancaster, S. J. Blundell, P. J. Baker, R. H. Liu, G. Wu, X. H. Chen, I. Watanabe, V. K. Malik *et al.* *Phys. Rev. Lett.* **101** 097010 (2008)
- [5] H. Leutkens, H.-H. Klauss, M. Kraken, F. J. Litterst, T. Dellmann, R. Klingeler, C. Hess, R. Khasanov, A. Amato, C. Baines *et al.* *Nat. Mat.* **8** 305 (2009)
- [6] R. J. McQueeney, S. O. Diallo, V. P. Antropov, G. D. Samolyuk, C. Broholm, N. Ni, S. Nandi, M. Yethiraj, J. L. Zarestky, J. J. Pulikkotil, A. Kreysigg, M. D. Lumsden, B. N. Harmon, P. C. Canfield, A. I. Goldman, *Phys. Rev. Lett.* **101** 227205 (2008)
- [7] Z. P. Yin, S. Lebeque, M. J. Han, B. P. Neal, S. Y. Savrasov, W. E. Pickett, *Phys. Rev. Lett.* **101** 047001 (2008)
- [8] F. Ma, Z.-Y. Lu, *Phys. Rev. B* **78** 033111 (2008)
- [9] M. J. Han, Q. Yin, W. E. Pickett, S. Y. Savrasov, *Phys. Rev. Lett.* **102** 107003 (2009)
- [10] F. Ma, W. Ji, J. Hu Z.-Y. Lu, T. Xiang, *Phys. Rev. Lett.* **102** 177003 (2009)
- [11] Q. Si, E. Abrahams, *Phys. Rev. Lett.* **101** 076401 (2008)
- [12] J. Dong *et al.* *Europhys. Lett.* **83** 27006 (2008)
- [13] J. Hubbard, *Proc. Roy. Soc. (London)* **A276** 238 (1963)
- [14] K. Yosida, *Theory of Magnetism*, Springer-Verlag, 1996
- [15] E. Manousakis, *Rev. Mod. Phys.* **63** 1 (1991)
- [16] R. R. P. Singh, Z. Weihong, C. J. Hamer, J. Oitmaa, *Phys. Rev. B* **60** 7278 (1999)
- [17] S. V. Tyablikov *The Methods in the Quantum Theory of Magnetism*, Plenum Press, 1967

- [18] W. Nolting, A. Ramakanth, *Quantum Theory of Magnetism*, Springer, 2009
- [19] B. S. Tošić, *Statistička fizika*, PMF u Novom Sadu, Novi Sad (1978),
M. Pantić, *Predavanja iz statističke fizike* (skripta), Novi Sad, 2009
- [20] M. Holt, O. P. Sushkov, D. Stanek, G.S. Uhrig, Phys. Rev. B **83** 144528 (2011)
- [21] G. S. Uhrig, M. Holt, J. Oitmaa, O. P. Sushkov, R. P. Singh, Phys. Rev. B **79** 092416 (2009)
- [22] I. N. Bronshtein, K. A. Semendyayev, G. Musiol, H. Muehliq, H. Muhliq, *Handbook of Mathematics*, Springer, 2004
- [23] S. Hassani, *Mathematical Physics: A Modern Introduction to Its Foundations*, Springer, 2006
- [24] H. B. Callen, Phys. Rev. **130** 890 (1963)
- [25] F. J. Dyson, Phys. Rev. **102** 1217, (1956)
- [26] S. V. Maljejev, Zh. Ekspr. Teor. Fiz. **33** 1010 (1957)
- [27] M. M. Korshunov, I. Eremin, Phys. Rev. B **78**, 140509(R) (2008)
- [28] Alexander Altland, Ben Simons, *Condensed Matter Field Theory*, Cambridge University Press, (2006)
- [29] T. Yildirim, Phys. Rev. Lett. **101** 057010 (2008)
- [30] A. Ong, G. S. Uhrig, O. P. Sushkov, Phys. Rev. B **80** 014514
- [31] D. Stanek, O. P. Shuskov, G. S. Uhrig, arXiv:1104.1954v1, 11 Apr 2011
- [32] F. Ma, Z.-Y. Lu, T. Xiang, Phys. Rev. B **78** 140509(R) (2008)
- [33] S. Raghu, X. L. Qi, C. X. Liu, D. J. Scalapino, S. C. Zhang, Phys. Rev. B **77** 220503(R) (2008)
- [34] M. S. Torikachvili, S. L. Bud'ko, P. C. Canfield, Phys. Rev. Lett. **101**, 057006 (2008)
- [35] R. Applegate, J. Oitmaa, R. R. P. Singh, Phys. Rev. B **81**, 024505 (2010)



Biografija

Rodjen sam u Somboru 18. septembra 1986. Pohadjao sam Osnovnu školu 'Nikola Vukičević', a nakon toga 'Somborsku gimnaziju'. Osnovne studije fizike na Prirodno-matematičkom fakultetu u Novom Sadu sam upisao 2006. godine. Treću godinu studija (akademska 2008/2009 godina) sam proveo na Illinois State University u Normalu, savezna država Ilinoj, u sklopu Forecast programa razmene. U septembru 2011. godine sam dao sve ispite predviđene planom i programom za master studije, i time stekao pravo da branim diplomski-master rad i steknem diplomu i zvanje mastera teorijske fizike kondenzovane materije.

UNIVERZITET U NOVOM SADU
PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET

KLJUČNA DOKUMENTACIJSKA INFORMACIJA

Redni broj:

RBR

Identifikacioni broj:

IBR

Tip dokumentacije:

Monografska dokumentacija

TD

Tip zapisa:

Tekstualni štampani materijal

TZ

Vrsta rada:

Diplomski rad

VR

Autor:

Milan Vujinović, br. dos. 398M/10

AU

Mentor:

dr Milan Pantić

MN

Naslov rada:

Teorijski modeli za magnetne osobine pniktida gvoždja

NR

Jezik publikacije:

srpski (latinica)

JP

Jezik izvoda:

srpski/engleski

JI

Zemlja publikovanja:

Srbija

ZP

Uže geografsko područje:

Vojvodina

UGP

Godina:

2011

GO

Izdavač:

Autorski reprint

IZ

Mesto i adresa:

Prirodno-matematički fakultet, Trg Dositeja Obradovića 4, Novi Sad

MA

Fizički opis rada:

5/64/34/1/4/11/3

FO

Naučna oblast:

Fizika

NO

Naučna disciplina:

Teorijska fizika kondenzovane materije

ND

Predmetna odrednica/ ključne reči:

Hajzenbergov model, Grinove funkcije, pniktidi gvoždja

PO

UDK

Čuva se:

Biblioteka departmana za fiziku, PMF-a u Novom Sadu

ČU

Važna napomena:

nema

VN

Izvod:

IZ

U radu je primenjen Hajzenbergov model za opis magnetnih osobina pniktida gvoždja. Korišćeni su spinski formalizam u aproksimaciji slučajnih faza i bozonski formalizam u Blohovej aproksimaciji. Dobijene su i numerički analizirane magnetizacija, disperzija i brzine spinskih talasa na temperaturi apsolutne nule za spin $\frac{1}{2}$ i spin 1. Zaključeno je da model ne daje potpuno zadovoljavajuće rezultate i da su potrebne modifikacije.

Datum prihvatanja teme od NN veća:

Avgust 2011

DP

Datum odbrane:

22. 09. 2011

DO

Članovi komisije:

KO

Predsednik:

Dr Darko Kapor, redovni profesor PMF-a u Novom Sadu

član:

Dr Milan Pantić, vanredni profesor PMF-a u Novom Sadu

član:

Dr Milica Pavkov-Hrvojević, vanredni profesor PMF-a u Novom Sadu

UNIVERSITY OF NOVI SAD
FACULTY OF SCIENCE AND MATHEMATICS

KEY WORDS DOCUMENTATION

Accession number:

ANO

Identification number:

INO

Document type:

Monograph publication

DT

Type of record:

Textual printed material

TR

Content code:

Final paper

CC

Author:

Milan Vujinović, rec. No. 398M/10

AU

Mentor/comentor:

Dr Milan Pantić

MN

Title:

Theoretical Models for Magnetic Properties of Iron Pnictides

TI

Language of text:

Serbian (Latin)

LT

Language of abstract:

English

LA

Country of publication:

Serbia

CP

Locality of publication:

Vojvodina

LP

Publication year:

2011

PY

Publisher:

Author's reprint

PU

Publication place:

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

PP

Physical description:

5/64/34/1/4/11/3

PD

Scientific field:

Physics

SF

Scientific discipline:

Theoretical Condensed Matter Physics

SD

Subject/ Key words:

Heisenberg model, Green's functions, iron pnictides

SKW

UC

Holding data:

Library of Department of Physics, Trg Dositeja Obradovića 4

HD

Note:

none

N

Abstract:

AB

In this paper we have used the Heisenberg model to describe the magnetic properties of iron pnictides. We have used the spin formalism in random phase approximation and the boson formalism in Bloch's approximation. We have obtained and numerically investigated the magnetization, dispersion and spin wave velocities for absolute zero temperature for spin $\frac{1}{2}$ and spin 1. We concluded that the model is not completely satisfactory and that modifications are required.

Accepted by the Scientific Board:

August 2011

ASB

Defended on:

22.09.2011

DE

Thesis defend board:

DB

President:

Dr Darko Kapor, full professor, Faculty of Science, Novi Sad

Member:

Dr Milan Pantić, Associate professor, Faculty of Science, Novi Sad

Member:

Dr Milica Pavkov-Hrvojević, Associate professor, Faculty of Science, Novi Sad

