PRIRODNO-MATEMATIČKI FAKULTET
UNIVERZITET U NOVOM SADU
INSTITUT ZA FIZIKU

NEVRESA M. ŠABAČKIĆ

PRIMENA METODA SPEKTRALNE FUNKCIJE NA JEDAN MODEL ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA

- DIPLOMSKI RAD -

NOVI SAD, 1982.

Zahvaljujem se dr Darku Kaporu i dr Mariju Škrinjaru na pomoći u izboru teme i nesebičnoj pomoći prilikom izrade ovog rada.

Nevresa Šabačkić

S A D R Ž A J

UVOD

Proučavanje magnetnih osobina materijala nalazi se već godinama u žiži interesovanja nauka. Velika potražnja za tehnološkim savršenim materijalima podstiče na intenzivan kako eksperimentalni tako i teorijski rad, sa ciljem da se sazna što više o ponašanju magnetnih materijala i mikroskopskim mehanizmima koji leže u osnovi magnetnih pojava. Niz modela formiranih do sada (1, 2, 3) znatno su doprineli boljem poznavanju ovih fenomena, ali većina modela znatno pojednostavljuje pojavu. Stoga se pojavila potreba za realističnijim opisivanjem, znači, modelima koji će uzimati u obzir i neke efekte koji se u najnižoj aproksimaciji ne uzimaju u obzir, na primer anizotropija.

U ovom radu će biti razmatran jedan model anizotropnog Hajzenbergovog feromagnetika sa ciljem nalaženja energije elementarnih ekscitacija, spontane magnetizacije na niskim temperaturama i energetskog procepa na T=ok. Biće primenjena tehnika direktnog računa spektralne intenzivnosti.

1. MAGNETNI MATERIJALI I FEROMAGNETIZAM

Magnetne osobine su svojstva svih čvrstih tela a karakterišu se pomoću magnetizacije $\vec{M}$. Magnetizacija $\vec{M}$ je definisana kao magnetni moment po jedinici zapremine:

1.1. $$\vec{M} = \frac{d\vec{m}}{dv}$$

i ona karakteriše dopunsko magnetno polje u materijalnim sredinama koje potiče od vezanih naelektrisanja. Pod pretpostavkom da je sredina izotropna i bez disperzije, magnetno polje slabo i i nije brzo primenjivo i dejstvo polja lokalno u prostoru i vremenu |1|, u odredjenom intervalu temperature magnetizacija $\vec{M}$ je linearno zavisna od jačine magnetnog polja.

1.2. $$\vec{M} = \chi \vec{H}$$

χ - magnetna susceptibilnost i karakteriše sposobnost tela da stekne namagnetisanje $\vec{M}$ u magnetnom polju jačine $\vec{H}$, a definiše se kao:

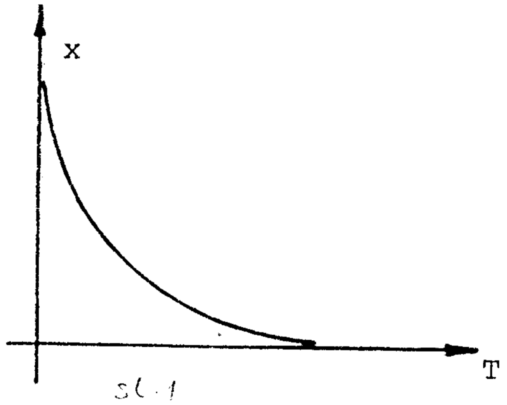
1.3. $$\chi = \lim_{H \to 0} \frac{\partial M}{\partial H}$$

Magnetni materijali se mogu podeliti u dve grupe. Prvu grupu čine slabi magnetici i to su:

a) dijamagnetici kod koji je $\chi < 0$ i ne zavise od temperature;
b) paramagnetici, kod kojih je $\chi > 0$ i zavisi od temperature po Kirijevom zakovu

1.4. $$\chi = \frac{C}{T}$$

gde je C- Kirijeva konstanta. Grafički prikaz zavisnosti megnetne suseceptibilnosti od temperature po Kirijevom zakonu data je na slici 1.



sl. 1

Drugu grupu magnetnih materijala čine jaki magnetici. Podela jakih magnetnih materijala se vrši na osnovu orijentacije matgnetnih momenata atoma po kristalografskim osama |5| i mogu ~~mogu~~ se podeliti na tri grupe:

a) feromagnetici

b) antiferomagnetici

c) ferimagnetici

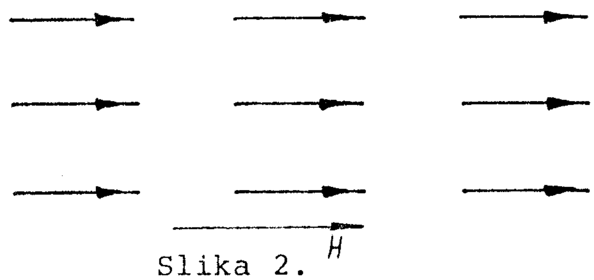
U ovom radu biće opisani samo feromagnetni materijali.

Prvu teoriju feromagnetizma dao je Veber prema kojoj magnet predstavlja skup uredjenih elemenatrnih magneta i sve magnetne pojave su rezultat razuredjivanja tog uredjenog skupa. Nedostatak ove teorije je taj što ne daje objašnjenje prirode elementarnih magneta. I savremena teorijska ražmatranja zasnivaju se na Veberovoj pretpostavci.

Vajs je 1907. god., tražeći odgovor na pitanje zašto feromagnetizam u željezu ne nastaje spontano, postavio hipotezu prema kojoj se svaka feromagnetna supstanca sastoji iz velikog broja domena (Vajsovi domeni) spontano namagnetisanih do zasićenja. Ako željezo nije prethodno namagnetisano svi domeni su haotično rasporedjeni, ali pod uticajem polja delimično se usmeravaju u pravcu polja što uslovljava ukupnu magnetizaciju različitu od nule. Znači kada željezo nije namagnetisano magnetni domeni su haotično orijentisani u prostoru i magnetizacija uzoraka u celini je jednaka nuli.

Feromagnetni materijali su elementi IV -grupe periodnog sistema i to su Fe, Co, Ni i njihove legure. Karakteristično je za ove elemente da im je unutrašnja 3d- ljuska nepopunjena. Eksperimentalno je pokazano da se magnetni moment jakih magnetnih materijala poklapa sa vrednostima sopstvenih magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljusaka i da orbitalni momenti ne daju vidan doprinos. Izmereni žiramagnetni moment g, feromagnetnih materijala je 2 i to je vrednost bliska vrednosti g za slobodan elektron. Hajzenberg je pretpostavio a o tome govori vrednost g=2, da spin elektrona nepopunjenih ljusaka odredjuje magnetne osobine materijala, odnosno uredjenost spinova elektrona nepopunjenih ljusaka atoma izaziva pojavu makroskopskog magnetnog momenta, a ova uredjenost nastaje usled interakcije izmedju elektrona. Kod feromagnetnih materijala pri temperaturama nižim od Kirijeve tačke svi spinovi su orijentisani u jednom pravcu i rezultujući magnetni moment je znatan, slika 2.

Spontana magnerizacija postoji do odredjene temperature za za feromagnetik to je Kirijeva temperatura iznad koje spontana magnetizacija nastaje i feromagnet prelazi u paramagnet.



Slika 2.

Za temperature $T > Tc$ magnetna susceptibilnost se menja po Kiri-Vajsovom zakonu:

1.5. $$\chi = \frac{C}{T-Tc} \qquad C = \frac{\ldots}{3 k_B}$$

Za njegovo objašnjenje može se pretpostaviti postojanje unutrašnjeg magnetnog polja $\vec{H}w$ nazvanog Vajsovo molekularno polje ili polje izmene koje je proporcionalno magnetizaciji $\vec{M}$

$$\vec{H}w \approx \frac{Tc}{C} \vec{M}$$

$$\vec{M} = \frac{C}{T} (\vec{H} + \vec{H}w)$$

$\vec{H}+\vec{H}w$ je rezultujuće polje. Zamenom $\vec{H}w$ u jednačinu sledi Kiri-Vajsov zakon.

$$\vec{M} = \frac{C}{T-Tc} \vec{H} = \chi \vec{H}$$

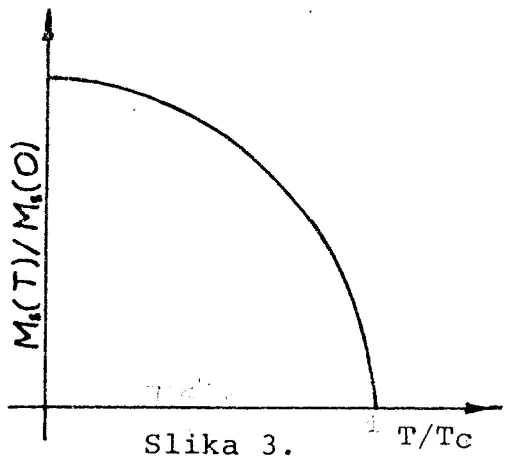
a χ je dato jednačinom 1.5.

Promena spontane magnetizacije sa temperaturom data je na slici 3. Sa slike se vidi da $m = Ms(T)/Ms(0)$ monotono opada sa porastom temperature $t = T/Tc$ i na temperaturi $T = Tc$, $m = 0$. Sa slike se vidi da je temperaturna zavisnost magnetizacije data izrazom:

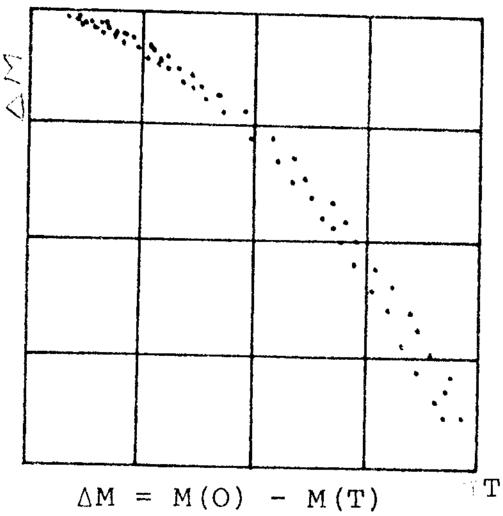
$$Ms(T) \sim (Tc-T)^{\beta} \quad \text{pri} \quad T < Tc$$

U prvoj aproksimaciji $\beta=1/2$.

Takva promena veličine Ms dozvoljava klasifikaciju prelaza paramagnetik-feromagnetik kao fazni prelaz drugog reda, tj. kao prelaz okarakterisan parametrom prelaza Ms, koji je različit od nule samo na $T < Tc$. Na niskim temperaturama zavisnost M od T je drugačija i za nikl je data na slici 4.|4|.



Slika 3.



Slika 4.

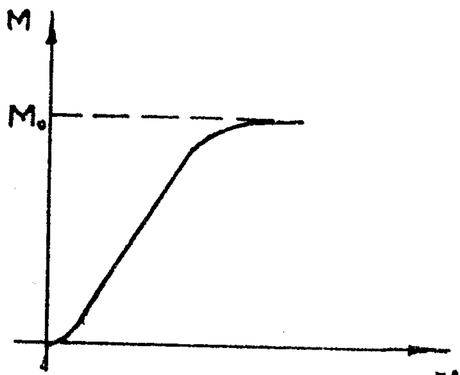
Magnetizacija zasićena je najveća moguća teorijska vrednost maggetizacije

$$\vec{M}o = N \cdot \vec{m}$$

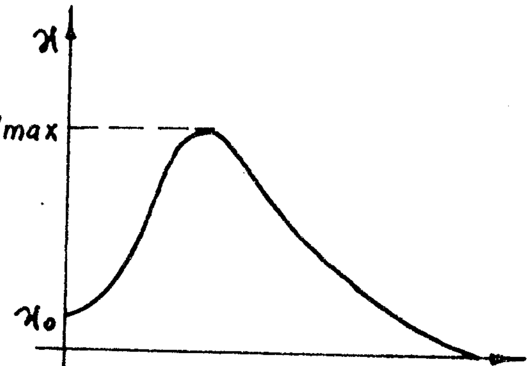
gde je m -magnetni moment atoma

N -broj atoma kristalne rešetke.

Usled toplotnih oscilacija atoma, anizotropije kao i konačnosti uzoraka merena vrednost magnetnog momenta je manja od Mo. Medjutim ako se uzorak nalazi u spoljašnjem magnetnom polju jačine H magnetizacija raste sa porastom polja. Tada svi spinovi počinju da skreću sa ose lake magnetizacije pravac u kojem su magnetni momenti orijentisani u odsustvu polja i usmeravaju se u pravcu polja $\vec{H}$. Pri nekoj vrednosti polja svi spinovi su orijentisani duž polja i sa daljim porastom jačine polja $\vec{H}$ magnetizacija ne raste tj. ne menja se slika 5., kaže se da je postignuto magnetno zasićenje. Na slici 6. je dat grafički prikaz zavisnosti magnetne suseceptebilnosti od jačine momentnog polja. Sa slike se vidi da kada $\vec{H} \to \infty$ susceptibilnost teži nuli i to je slučaj magnetne zasićenosti.

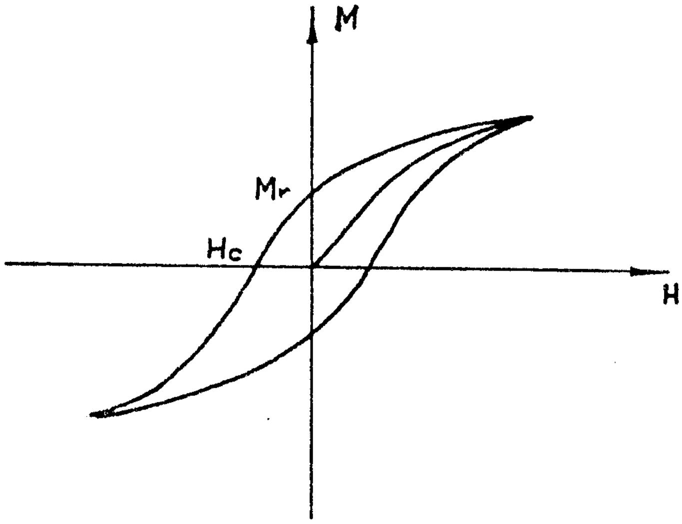


Slika 5.



Slika 6.

Veoma važna osobina feromagnerika je pojava histerezisa. Pojava histarezisa sastoji se u tome da namagnetisanje $\vec{M}$ (pa prema tome i magnetna indukcija $\vec{B}$ jer je $\vec{B} = \mu_0(\vec{H}+\vec{M})$ ne zavisi samo od jačine polja $\vec{M}$ koje vrši namagnetisanje u tom trenutku već i od toga kakva je jačina polja bila prethodno. Ako se posle zasićenja polje smanjuje, namagnetisanje se ne smanjuje po istoj krivoj, tako da u trenutku kada je H=0 postoji neko namagnetisanje koje se zove remanentno ili zaostalo namagnetisanje. Ako polje promeni smer i dalje se smanjuje namagnetisanje. Koercitivno polje H=Hc je polje potrebno da se uzorak feromagnetnog materijala sasvim razmagnetiše $\vec{M}$=0. Veličina ovog polja je različita za različite materijale (Hc je veće za jake magnetike a manje za slabe magnetike) i veoma je značajna u tehnici i tehnologiji. Daljim povećanjem polja magnetizacija se povećava sve do trenutka kada se postiže zasićenje ali u suprotnom smeru od prethodnog. Daljom promenom polja kriva se zatvara. Ova kriva se često zove histerezisna petlja (slika 7.). Proces namagnetisanja feromagnetnih materijala prati se kroz promenu njihovih linearnih dimenzija pa prema tome i zapremine. Ova pojava se zove magnetostrikcija njena veličina i znak zavise od jačine polja H i ugla koji zaklapa smer polja sa kristalografskom osom. Energija deformacije koja je povezana reakcijom magnetnih momenata atoma naziva se energija magnetostrikcije.



Slika 7.

Kristalni feromagnetici pokazuju anizotropiju magnetnih osobina, tj. u jednom slučaju se kristal namagnetiše lakše u drugom teže. Energija feromagnetnog materijala koji usmerava namagnetisanost duž ose lake magnetizacije naziva se energija kristalografske anizotropije.

2. HAJZENBERGOV FEROMAGNET

Kako je već rečeno, Hajzenberg je pretpostavio da je pojava makroskopskog magnetnog momenta posledica uredjenosti spinova a uzrok uredjenosti je interakcija izmene izmedju elektrona. Interakciju izmene su otkrili istovremeno Hajzenberg i Dirak a mnogu drugi naučnici su se bavili ovim problemom.

Interakcija izmene je kvantnomehanički efekat i sledi iz osobine nerazlikovanja čestica. Prema kvantnoj mehanici elektron nema potpuno odredjenu putanju nego se samo može odrediti verovatnoća nalaženja elektrona u atomu ili u okolini tačke. Kao posledica talasnih osobina elektrona javlja se osobina nerazlikovanja elektrona kao identičnih čestica.

Posmatrajmo sistem elektrona opisan talanom funkcijom $\Psi(\xi_1,\ldots\xi_i,\ldots\xi_j,\ldots\xi_n)$. Permutacija od N-članova sadrži više transpozicija, P_{ij} je operator transpozicije (permutacije) i njegovo dejstvo na talasnu funkciju ogleda se u tome da on menja mesta kvantnim brojevima.

$$P_{ij}\ \Psi(\xi_1,\ldots\xi_i,\ldots\xi_j) \overset{def}{=} \Psi(\xi_1,\ldots\xi_j,\ldots\xi_i)$$

Operator P_{ij} ima svojstvenu vrednost ± 1, a to znači da kada čestice zamene mesta talasna funkcija ili ne menja znak - simetrična funkcija ili menja znak - antisimetrična funkcija.

Funkcija može da se napiše kao proizvod jednočestičnih stanja tj.

$$\Psi = \phi_{k1}(\xi_1)\cdot\phi_{k2}(\xi_2)\ \ldots$$

gde ϕ -obeležava u kojem stanju se nalazi čestica. Ako posmatramo samo dve čestice opisane funkcijama $\phi_{k1}(\xi_1)$ i $\phi_{k2}(\xi_2)$.

Identične čestice se dele na dve grupe s principijelno različitim statističkim svojstvima povezanim sa spinom čestice. Čestice sa polucelobrojnim spinom $S = 1/2,\ 3/2\ \ldots$ su fermioni i podležu ~~su~~ Fermi-Dirakovoj statistici, prema kojoj, u jednom kvantnom stanju može da se nadje jedna čestica (Paulijev princip). Bozoni su čestice sa celobrojnim spinom (S=0,1,...) podležu Boze -Ajnštajnovoj statistici. Prema ovoj statistici i jednom kvantnom stanju može da se nadje ~~kao~~ ogranični broj čestica.

Bozoni se mogu opisati simetričnom talasnom funkcijom

$$2.1.\quad \Psi_s(\xi_1,\xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{k1}(\xi_1)\phi_{k2}(\xi_2) + \phi_{k1}(\xi_1)\phi_{k1}(\xi_1)\right]$$

a fermioni se opisuju antisimetričnom funkcijom

$$2.2.\quad \Psi_a(\xi_1,\xi_2) = \frac{1}{\sqrt{2}}\left[\phi_{k1}(\xi_1)\phi_{k2}(\xi_2) - \phi_{k1}(\xi_2)\phi_{k2}(\xi_1)\right]$$

gde je $1/\sqrt{2}$ faktor normiranja koji sledi iz uslova ortogonalnosti.

Šredingerova jednačina ne uzima u obzir spin elektrona zbog čega nije u mogućnosti da opiše sve osobine elektrona. Medjutim, ako je sistem elektrona van magnetnog polja, nema interakcije sopstvenog magnetnog momenta i spolješnjem polja, Šredingerova jednačina može se napisati u obliku proizvoda druge dve funkcije

$$\Psi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots,\vec{\sigma}_1,\vec{\sigma}_2,\ldots) = \phi(\vec{r}_1,\vec{r}_2,\ldots) \cdot X(\vec{\sigma}_1,\vec{\sigma}_2,\ldots)$$

gde funkcija $\phi(r_1,r_2,\ldots)$ zavisi samo od prostornih koordinata a $X(\sigma_1,\sigma_2,\ldots)$ od spinskih koordinata, σ je projekcija spina.

Ako se čestica nalazi u singletnom stanju $S=0$ (tada je $\vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2=-3/2$) spinska funkcija je odredjena antisimetričnom orijentacijom spinova a koordinatna funkcija je simetrična. U slučaju kada je $S=1$ tj. tripletno stanje ($\vec{S}_1\cdot\vec{S}_2 = 1/2$) spinska funkcija je odredjena paralelnom orijentacijom spinova a ϕ je antisimetrična, odnosno može se napisati sledeći izraz (uzimajući u obzir da je $\xi \equiv r$)

2.4. $$\phi^{\pm} = \frac{1}{\sqrt{2}} \left[\phi_{k1}(\vec{r}_1)\phi_{k2}(\vec{r}_2) \pm \phi_{k1}(\vec{r}_2)\phi_{k2}(\vec{r}_1)\right] \cdot X^{\pm}$$

Opšti oblik Šredingerove jednačine je

$$\hat{H}\Psi = E\Psi$$

a hamiltonijan mnogoelektronskog sistema je:

$$\hat{H} = -\sum_{i=1}^{N} \frac{\hat{p}_i^2}{2m} + \sum_i \hat{U}(\vec{r}_1) + \frac{1}{2}\sum_{ij} W(\vec{r}_i,\vec{r}_j)$$

gde prvi član predstavlja ukupnu kinetičku energiju sistema, treći član daje kulonovu interakciju izmedju elektrona dok drugi član ima oblik:

$$\hat{U}(\vec{r}_i) = \sum_{\alpha} \frac{(-z_{\alpha} e^2)}{\alpha(r_i - R)}$$

Rešenje jednačine za navedeni hamiltonijan je:

$$\Delta E^{o}_{k1k2} = \langle \phi^{*}_{sa} | U(r_1-r_2) | \phi_{sa}\rangle = \iint d^3r_1 d^3r_2 \phi^{*}_{sa} \hat{U} |\vec{r}_1-\vec{r}_2| \phi_{sa}$$

u nultoj aproksimaciji $U=0$ i energija je data izrazom:

2.5. $$\Delta E^{o}_{k_1k_2} = \varepsilon_{k1} + \varepsilon_{k2}$$

Ukupna promena energije je u prvoj aproksimaciji teorije perturbacija data je izrazom:

$$\Delta E^{I}_{k_1 k_2} = \frac{1}{2} \iint d^3\hat{r}_1 d^3\hat{r}_2 [\phi^*_{k1}(\vec{r}_1)\phi^*_{k2}(\vec{r}_2) \pm$$

$$\pm \phi^*_{k1}(\vec{r}_2)\phi^*_{k2}(\vec{r}_1)]\hat{U}(r_1-r_2) \cdot [\phi_{k1}(\vec{r}_1)\phi_{k2}(\vec{r}_2) \pm$$

$$\pm \phi_{k1}(\vec{r}_2)\phi_{k2}(\vec{r}_1)]$$

$\hat{U}|\vec{r}_1-\vec{r}_2| = \hat{U}|r_2-r_1|$ ($\hat{U}$ je invarijantna na promenu koordinata).

Konačan izraz za promenu energije napisan u skraćenom obliku je

2.6. $$\Delta E = A \pm J$$

gde je

$$A = \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 |\phi_{k1}(\vec{r}_1)|^2 |\phi_{k2}(\vec{r}_2)|^2 U(\vec{r}_1-\vec{r}_2) =$$

$$= \iint \frac{dq_1\, dq_2}{(\vec{r}_1-\vec{r}_2)} \qquad 2.7.$$

$$dq_1 = e|\phi_{k1}(\vec{r}_1)|^2 dr_1$$

$$dq_2 = e|\phi_{k2}(\vec{r}_2)|^2\, dr_2$$

i predstavlja srednju enerfiju medjusobnog odbijanja dva elektronska oblika po Kulonovom zakonu tj. Kulonovska interakcija.

Drugi član u jednačini 2.6 je integral izmene dejstva koji proizilazi iz osobine nerazlikovanja čestica, a dat je izrazom:

2.8. $$J = \iint d^3\vec{r}_1 d^3\vec{r}_2 \phi^*_{k1}(r_1)\phi_{k2}(\vec{r}_2)\phi^*_{k2}(\vec{r}_2)\phi_{k1}(r_2)U(\vec{r}_1-\vec{r}_2)$$

J je različito od nule samo ako se orbitale ϕ_{k1} i ϕ_{k2} medjusobno preklapaju.

Sada se može napisati izraz za ukupnu energiju sistema i glasi:

2.9. $$E^{\pm}_{k1k2} = \varepsilon_{k2} + \varepsilon_{k2} + A \mp J$$

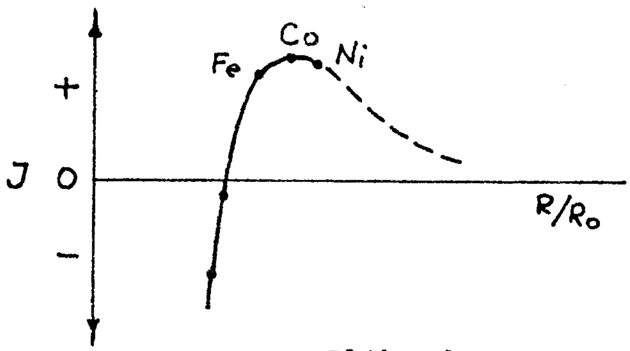
znači, mada su spinovi paralelni energija je veća nego u slučaju antiparalelnih spinova.

Izračunavanje integrala izmene dejstva je veoma komplikovano, i u principu je proporcionalan medjuatomskom rastojanju u kristalu.

Za slučaj kada je $R \ll a_o$ nadjeno je da je:

$$J = \frac{e^2}{R} \left\{ 1 - \frac{11}{8} \frac{R_o}{a_o} - \frac{1}{3} \left(\frac{R}{a_o}\right)^2 + \ldots \right\}$$

a_o je konstanta rešetke. Grafički prikaz zavisnosti $\frac{R}{a_o}$ od J od R/a_o je dat na slici 8.



Slika 8.

Prema aproksimaciji Hartri-foka (4) integral izmene dejstva jednak je polovini razlike energije s paralelnim i antiparalelnim spinovima

$$J_{1,2} = \frac{1}{2}(E_s - E_a)$$

U slučaju kada je $J > 0$ reč je o feromagneticima a antiferomagnetici imaju integral izmene manji od nule ($J < 0$).

Razlika energije se može napisati i u obliku

$$E_{izm} = -\frac{1}{2} J_{1,2} \cos\theta = -2 J_{1,2} \vec{S}_1 \cdot \vec{S}_2$$

θ je ugao medju spinovima $\vec{S}_1$ i $\vec{S}_2$.

U slučaju više integrirajućih spinova izmene energije se može napisati u obliku

$$H_{izm} = -2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} J_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}} S_{\vec{m}} \qquad 2.10.$$

i to je hamiltonijan Hajzenbergovog feromagnetika a $\vec{S}_n$ i $\vec{S}_m$ su spinovi u čvorovima $\vec{n}$ i $\vec{m}$.

Na kraju se može reći da elektrostatičke sile koje deluju medju elektronima odredjuju konfiguraciju spinova u atomu, molekulu i čvrstom telu saglasno Poulijevom principu.

Spinovi elektrona koji se nalaze u atomu ili molekulu povezani su integracijom izmene koja sledi iz Poulijevog principa i elektr elektronske Kulonove integracije.

Hamiltonijan Hajzenbergovog feromagnetika koji se nalazi u magnetnom polju dat je izrazom

$$2.11. \qquad H = -g\mu_\beta H \sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} J_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}} \cdot S_{\vec{m}}$$

gde je g - Landeov faktor

μ_β - Borov magneton

H - spoljašnje magnetno polje.

Kvantna teorija feromagnetizma pretpostavlja da su na apsolutnoj nuli svi spinovi paralelno orijentisani i da su sve projekcije spinova svih atoma jednaki maksimalnoj vrednosti spina S i magnetizacija je maksimalna.

$$M(0) = \mu \cdot S \cdot N$$

μ - je magnetni poment atoma
N - broj atoma kristalne rešetke
S - maksimalna vrednost spina.

Porastom temperature magnetizacija se smanjuje jer se otklanja z-projekcija spinova od njihove maksimalne vrednosti. Promena magnetizacije može se pratiti preko relativne magnetizacije koja je data izrazom:

$$\sigma = \frac{M}{M_{sat}}$$

$$M = \sum_n \langle S_n^z \rangle = \langle S_n^z \rangle \sum_n 1 = N \langle S_n^z \rangle$$

2.12. $$\sigma = \frac{N \langle S_n^z \rangle}{N \cdot S} = \frac{\langle S_n^z \rangle}{S}$$

Za spinske operatore $S_n^z = S_n^x \pm i S_n^y$ i S_n^z odnosno

2.13. $$S_n^x = \frac{S_n^+ + S_n^-}{2}, \quad S_n^y = \frac{S_n^+ - S_n^-}{2i} \quad \text{i} \quad S_n^z = s - \delta S$$

Važe sledeće komutacione relacije

$$[S_n^+, S_m^-] = 2 S_n^z \delta_{nm}$$

$$(S_n^+)^{2S+1} = (S_n^-)^{2S+1} = 0$$

$$\{S_n^+ S_n^-\} = 2S(S+1) - 2(S_n^z)^2 .$$

Spinski operatori koji se odnose na različite čvorove komutiraju. Dozvoljene projekcije spina su S, S-1, S-1, ..., - S, tako da operatori $S-S^z$ imaju konačan skup svojstvenih vrednosti 0,1,2,...,2S, odakle sledi da komutacione relacije za spinske operatore nisu ni bozonskog ni feromagnetskog tipa što je osnovna teškoća u teoriji magnetizma.

U slučaju spina S=1/2 spinski operatori se mogu zameniti Pauli operatorima na sledeći način:

2.14. $S^{-} = P^{+}$; $S^{+} = P$; $\frac{1}{2} - S^{z} = P^{+}P$

Pauli operatori zadovoljavaju sledeće komutacione relacije

2.15. $\left[P^{+}_{\vec{n}}\, P^{+}_{\vec{m}}\right] = \left[P_{\vec{n}}\, P_{\vec{m}}\right] = 0$

2.16. $\left[P_{\vec{n}}\, P^{+}_{\vec{m}}\right] = \left(1-2P^{+}_{\vec{n}}\, P_{\vec{n}}\right)\delta_{nm}$

2.17. $P^{+2}_{\vec{n}} = P^{2}_{\vec{n}} = 0$

Operator $P^{+}_{n}\, P_{n}$ ima dve svojstvene vrednosti 0 i 1.

3. HAMILTONIJAN ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA IZRAŽEN PREKO PAULI OPERATORA

Anizotropija feromagnetika se objašnjava spin-orbitalnom interakcijom medju spinskim momentima količine kretanja i orbitalnog momenta elektrona. U osnovnom stanju moment konačne kretnje jednak je nuli i anizotropija se javlja kao slab efekt druge vrste. Može nastati kolektivnopomeranje koje ukida otbitalnu degeneraciju osnovnog stanja (promeranje JAN-TELERA).

Ovo pomeranje snižava simetriju kristala. Mi ćemo razmatrati jedan specijalan slučaj /10/ .

Posmatrajmo jednu kubnu feromagnetnu rešetku koju formiraju joni sa neparnim brojem elektrona. Ako su oni u osnovnom stanju tada je inetrakcija izmene ovih jona anizotropna. Kako interakcija brzo opada sa rastojanjem dovoljno je zadržati se na interakciji najbliži suseda.Za vrednost spina S=1/2 magnetni moment atoma. U osnovnom stanju $M=g\mu\cdot S$, hamiltonijan takvog sistema u pravcu z-oce /6/ je dat izrazom:

3.1. $H_{\vec{n}\vec{m}} = J_{\parallel} S^{z}_{\vec{n}} S^{z}_{\vec{m}} + J_{\perp}\left(S^{x}_{\vec{n}}\, S^{x}_{\vec{m}} + S^{y}_{\vec{n}}\, S^{y}_{\vec{m}}\right)$

Ako uvedemo smenu $J = J_{\perp}$ a $J' = J_{\parallel} - J_{\perp}$ izraz 3.1. se može napisati u pogodnijem obliku

3.1. $$H_{\vec{n}\vec{m}} = - JS_{\vec{n}} S_{\vec{m}} + J' S^z_{\vec{n}} S^z_{\vec{m}}$$

Ukupni hamiltonijan anizotropnog feromagnetika koji se nalazi u spoljašnjem magnetnom polju jačine $\mathcal{H}$ je :

3.3. $$H = - J \sum_{\vec{n}\vec{m}} S_{\vec{n}} S_{\vec{m}} + J' \sum_{n=1} \sum_{r=1}^{3} S^r_{\vec{n}} S^r_{\vec{n}+\varepsilon r} - g\mu_{\beta} \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}}$$

sumiranje se vrši po svim najbližim susedima, n -uzima sve vrednosti ukupnog broja ekvivalentnih jona N, r ima vrednost x,y,z Spin n+ r je sused spina n koji se nalazi u pozitivnom smeru x-ose na rastojanju a (a je konstanta rešetki).

Kada je $J'=0$ tj. $J_{\parallel} = J_{\perp}$ hamiltonijan 3.3. je obični Hanzenbergov hamiltonijan izotropnog feromagnetika. Feromagnetna konfiguracija postoji pod uslovom da je $J_{\perp} < 0$ i $J_{\parallel} < 0$, i ose lake magnetizacije su x,y odnosno z, zato se magnetno polje usmerava u pravcu z-oce.

Hamiltonijan anizotropnog feromagnetika 3.3. može se izraziti preko Pauli operatora za slučaj spin S=1/2, postupak je sledeći:

Hamiltonijan 3.3. se prvo izrazi preko spinskih operatora S^+ i S^- datih relacija 2.3. Zatim se spinski operator zamenjuje Pauli operatorina 2.14. (za S=1/2) tako se konačno dobija Hamiltonijan anizotropnog feromagnetika:

3.4. $$H = H_o + H_2 + H_4$$

gde je

3.5. $$H_o = SN\Gamma - \frac{1}{2} S^2 NJ_o + NJ'S^2$$

$$\Gamma = g\, \mu_{\beta} \mathcal{H} \quad \text{i} \quad J_o = \sum_{n} J_{om}$$

3.7. $$H_2 = (\Gamma + \tfrac{1}{2}J_o - J') \sum_{n} P^+_n P_n - \frac{1}{2} \sum_{nm} J_{nm} P^+_n P_m + \frac{1}{4} \sum_{nm} J'_{nm} [(\delta_{m,n+\varepsilon x} + \delta_{m,n-\varepsilon x}) + (\delta_{m,n+\varepsilon y} + \delta_{m,n-\varepsilon y})] P^+_n P_m + \frac{1}{4} \sum_{nm} J'_{nm} (\delta_{m,n+\varepsilon x} - \delta_{m,n+\varepsilon y}) (P_n P_m + P^+_m P^+_n)$$

3.7. $$H_4 = -\frac{1}{2}\sum_{nm} J_{nm} P_n^+ P_n P_m^+ P_m + \sum_{nm} J'_{nm}(\delta_{m,n+\varepsilon z} + \delta_{m,n-\varepsilon z}) P_n^+ P_n P_m^+ P_m$$

Ako se u gornjim relacijama uzime da je $J'=0$, dobićemo hamiltonijan izotropnog feromagnetika /5/.

Relativna magnetizacija izražena preko Pauli operatora data je izrazom:

3.8. $$\sigma = \frac{\langle S^z \rangle}{S} = 1 - 2 \langle P_n^+ P_n \rangle = 1 - 2\bar{n}$$

$\bar{n}$ je srednja vrednost Paulina.

Navedeni oblik hamiltonijama koristićemo u sledećem radu.

4. MAGNETIZACIJA ANIZOTROPNOG FEROMAGNETIKA ZA SPIN S=1/2 NA NISKIM TEMPERATURAMA

Koristeći izračunati hamiltonijan potrebno je naći izraz za zakon dispersije sa tačnošću k^6. Dobijeni izraz koristi se za izračunavanje magnetizacije sa tačnošću $T^{9/2}$. Na kraju ~~je~~ treba naći energetski procenat i pokazati da je $E_o/J \approx \delta^2$.

4.1. Zakon dispersije

Za izračunavanje zakona dispersije neće se koristiti metod Grinovih funkcija, nego alternativni metod tj. metod spektralne intenzivnosti.

Srednja vrednost komutatora dva operatora se može izračunati pomoću korelacionih funkcija na sledeći način:

$$J_{AB}(x-x', t-t') = \langle A(x,t)\hat{B}(x',t')\rangle = \int_{\infty}^{\infty} J_{AB}(x-x',\omega) e^{-i\omega(t-t')}$$

$$J_{AB}(x-x', t-t') = \langle \hat{B}(x',t')\hat{A}(x,t)\rangle = \int_{\infty}^{\infty} J_{AB}(x-x',\omega) e^{-i\omega(t-t')}$$

$$<[A(x,t)B(x',t')]> = \int_{-\infty}^{\infty} [J_{AB}(x-x',\omega) - J_{BA}(x-x',\omega)] e^{-i\omega(t-t')} d\omega$$

$$= \int_{-\infty}^{\infty} J_{AB}(x-x',\omega)(e^{\omega/\theta}-1)e^{-i\omega(t-t')}d\omega = \int_{-\infty}^{\infty} S_{BA}(x-x',\omega)e^{-i\omega(t-t')}d\omega$$

gde je $S_{AB}(x-x',\omega) = J_{BA}(x-x',\omega)(e^{\omega/\theta}-1)$

Konačna spektralna intenzivnost može da se napiše na sledeći način:

4.1. $$<[A(t),B(t')]> = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}$$

Operatori A i B mogu biti bilo koji drugi operatori, u ovom slučaju zamenićemo ih Pauli operatorima.

$$A(t) = P_{\vec{a}}(0) \qquad i \qquad B(t) = P_{\vec{b}}^{+}(t)$$

Tako da se izraz 4.1. može napisati preko Pauli operatora

4.2. $$<[P_{\vec{a}}(0),\ P_{\vec{b}}^{+}(t)]> = \int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega)e^{-i\omega(t-t')}$$

Operator $P_{\vec{b}}^{+}(t)$ je dat u Hajzenbergovoj reprezentaciji

$$P_{b}^{+}(t) = e^{+i\hat{H}t}\, P_{b}(0)e^{-i\hat{H}t}$$

i može se razviti u red po t, koristeći definiciju komutatora i razvoj eksponencijalne funkcije,

$$P_{b}^{+}(t) = P_{\vec{b}}^{+}(0) + it[\hat{H},P_{b}^{+}(0)] + \frac{(it)^2}{2!}[\hat{H},[\hat{H},P_{b}^{+}(0)]] + \ldots$$

Sa desne strane jednačine 4.2. figuriše eksponencijalna funkcija koja se razvija u red na sledeći način:

$$e^{i\omega t} = 1 + i\omega t + \frac{(i\omega t)^2}{2!} + \ldots$$

Dobijeni razvoj se uvrštava u jednačinu 4.2. i poredjenjem koeficijenata leve i desne strane uz iste stepene argumenta t, dobija se sledeća jednačina za spektralnu funkciju i njene momente.

4.3. $$\int_{-\infty}^{\infty} d\omega\, S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) = <[P_a,P_b^{+}]>$$

4.4. $$\int_{\infty}^{\infty} d\omega\, S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega)\cdot\omega = \langle [P_a, [H, P_b^+]] \rangle$$

$$\int_{\infty}^{\infty} d\omega\omega^n\, S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) = \langle [P_a, [\ldots [H, [H, P_b^+]]] \rangle; P_{\vec{a}}(0) =$$

$$= P_{\vec{a}},\ P_{\vec{b}}^+(0) = P_b^+$$

U daljem radu uvodi se aproksimacija tako da se zadržavamo samo na relacijama 4.3 i 4.4., jer se u razvoju komutatora, komutatori višeg reda zanemaruju.

Posmatrajmo jednačinu 4.3. i kako je već u prethodnoj glavi rečeno komutator na desnoj strani jednačine dat je izrazom 2.17., tako da je srednja vrednost komutatora data izrazom

$$\langle [P_a, P_b^+] \rangle = \langle 1 - 2P_a^+P_a \rangle \delta_{\vec{a}\vec{b}} = \{1 - 2\langle P_a^+P_a \rangle\}\delta_{\vec{a}\vec{b}}$$

a član u zagradi predstavlja relativnu magnetizaciju.

4.5. $$\int_{\infty}^{\infty} d\omega\, S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) = \{1 - 2\langle P_a^+P_a \rangle\}\, \delta_{\vec{a}\vec{b}} = \sigma\, \delta_{\vec{a}\vec{b}}$$

Da bi ovo bilo ispunjeno moramo primeniti Dirovu δ-funkciju na jednačinu 4.5.

4.6. $$S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) = \sigma\, \delta_{\vec{a}\vec{b}}\, \delta(\omega - E)$$

U daljem radu polazeći od relacije 4.4. tražimo spektar elementarnih ekscitacija a prethodno je potrebno uvesti furije transformacije

4.7. $$S_{\vec{a}\vec{b}}(\omega) = \frac{1}{N} \sum_q S_{\vec{q}}(\omega) e^{i\vec{q}(\vec{a}-\vec{b})}$$

Inverzna furije-transformacija je:

4.8. $$S_{\vec{q}}(\omega) = \sum_{\vec{a}-\vec{b}} S_{(\vec{a}-\vec{b})} e^{-i\vec{q}(\vec{a}-\vec{b})}$$

4.9. $$\delta_{\vec{a}\vec{b}} = \frac{1}{N} \sum_q e^{i\vec{q}(\vec{a}-\vec{b})}$$

dobijamo da je

4.10. $$S_{\vec{k}}(\omega) = \sigma\delta\;(\omega - E)$$

4.11. $$I_{\vec{k}}(\omega) = S_{\vec{k}}(\omega)\,(e^{\omega/\theta} - 1)^{-1}$$

Dalje je potrebno naći komutatore s desne strane jednačine 4.4. ako je hamiltonijan anizotropnog feromagnetika dat relacijama 3.5., 3.6. i 3.7. U komutator $[H, P_b^+]$ zamenjuje se navedeni hamiltonijan i za izračunavanje koriste se sledeće osobine komutatora

$$[A+B, C] = [AC] + [B,C]$$
$$[AB, C] = A[B,C] + [A,C]B$$

Prema tome

$$[H, P_b^+] = [H_o + H_2 + H_4, P_b^+] = [H_o, P_b^+] + [H_2, P_b^+ + H_4 P_b^+]$$

H_o je konstanta pa je komutator $[H_o P_b^+] = 0$ $[H_2, P_b^+]$ i $[H_4, P_b^+]$ se računaju posebno i njihove vrednosti su

$$[H_2, P_b^+] = (\Gamma + \frac{1}{2} J_o - J') \sum_n [P_n^+ P_n, P_b^+] - \frac{1}{2} \sum_{nm} J_{nm} [P_n^+ P_m, P_b^+] +$$
$$+ \sum_{nm} J'_{nm} \cdot [(\delta_{m,n+\varepsilon x} + \delta_{m,n-\varepsilon x}) + (\delta_{m,n+\varepsilon y} + \delta_{m,n-\varepsilon y})] [P_n^+ P_m, P_b^+] +$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{nm} J'_{nm} (\delta_{m,n+\varepsilon x} - \delta_{m,n+\varepsilon y}) [P_n P_m + P_n^+ P_m^+, P_b^+]$$

$$[P_n^+ P_n, P_b^+] = P_n^+ (1 - 2P_n^+) \delta_{nb}$$

$$[P_r^+ P_m, P_b^+] = P_n^+ (1 - 2P_m^+ P_m) \delta_{mb}$$

Tako da se konačno dobija da je

$$[H_2, P_b^+] = (\Gamma + \frac{1}{2} J_o - J') P_b^+ - \frac{1}{2} \sum_n J_{nm} P_n^+ + \sum_n J_{nb} P_n^+ P_b^+ P_b + \frac{1}{4} \sum_n J'_{nb}$$
$$[(\delta_{b,n+\varepsilon x} + \delta_{b,n-\varepsilon x}) + (\delta_{b,n+\varepsilon x} + \delta_{b,n-\varepsilon y})] P_n^+ - \frac{1}{2} \sum_n J'_{nb} [(\delta_{b,n+\varepsilon x} +$$
$$+ \delta_{b,n-\varepsilon x}) + (\delta_{b,n+\varepsilon y} + \delta_{b,n-\varepsilon y})] P_n^+ P_n P_b + \frac{1}{2} \sum_n J'_{nb} (\delta_{b,n-\varepsilon x} -$$
$$- \delta_{b,n+\varepsilon y}) P_n - \sum_n J'_{nb} (\delta_{b,n+\varepsilon x} - \delta_{b,n+\varepsilon y}) P_b^+ P_b P_n \;.$$

Za komutator $[H_4 P_b^+]$ dobijen je sledeći rezultat

$$[H_4, P_b^+] = -\sum_n J_{nb} P_b^+ P_n^+ P_n + \sum_n J'_{nb} (\delta_{b,n+\varepsilon z} + \delta_{b,n-\varepsilon z}) P_b^+ P_n^+ P_n$$

tako da je ukupan komutator

$$[H, P_b^+] = (\Gamma + \frac{1}{2} J_o - J') P_b^+ - \frac{1}{2} \sum_n J_{nb} P_n^+ + \sum_n J_{nb} P_n^+ P_b^+ + \frac{1}{4} \sum_n J'_{nb} \cdot$$
$$\cdot [(\delta_{b,n+\varepsilon x} + \delta_{b,b-\varepsilon x}) + (\delta_{b,n+\varepsilon y} + \delta_{b,n-\varepsilon y})] P_n^+ + \frac{1}{2} \sum_n J'_{nb} (\delta_{b,n+\varepsilon x} -$$
$$- \delta_{b,n+\varepsilon y}) P_n \cdot B - \frac{1}{2} \sum_n J'_{nb} [(\delta_{b,n+\varepsilon x} + \delta_{b,n-\varepsilon x}) + (\delta_{b,n+\varepsilon y} + \delta_{b,n-\varepsilon y})] \cdot$$
$$\cdot P_n^+ P_b^+ P_b - \sum_n J'_{nb} \cdot (\delta_{b,n+\varepsilon x} - \delta_{b,n+\varepsilon y}) P_b^+ P_b P_n - \sum_n J_{nb} \cdot$$
$$\cdot P_b^+ P_n^+ P_n + \sum_n J'_{nb} (\delta_{b,n+\varepsilon z} + \delta_{b,n-\varepsilon z}) \cdot P_b^+ P_n^+ P_n$$

Dalje se računa komutator sa desne strane jednačine 4.4. i njegova srednja vrednost , račun je identičan prethodnom, koristeći navedene osobine komutatora i osobine operatora dobija se sledeći izraz ,treba napomenuti da u izrazu za srednju vrednost zanemarene srednje vrednosti od četiri Pauli operatora jer su proporcionalni kvadrantu magnetizacije što je u skladu sa zahtevanom tačnošću koja ide do $T^{9/2}$.

4.13.

$$<[P_a, [H, P_b^+]]> = (\Gamma + \frac{1}{2} J_o - j')(1 - 2\bar{n})\delta_{ab} - \frac{1}{2} J_{ab}(1 - 4\bar{n}) + \frac{1}{2} \sum J_{na} <P_n^+ P_a> -$$
$$- \frac{1}{2} \sum_n J'_{na} [(\delta_{a,n+\varepsilon x} + \delta_{a,n-\varepsilon x}) + (\delta_{a,n+\varepsilon y} + \delta_{a,n-\varepsilon y})] < P_a^+ P_a > -$$
$$- \frac{1}{4} J'_{ab} [(\delta_{a,b+\varepsilon x} + \delta_{a,b-\varepsilon x}) + (\delta_{a,b+\varepsilon y} + \delta_{a,b-\varepsilon y})](1 - 4\bar{n}) -$$
$$- \sum_n J'_{na} (\delta_{a,n+\varepsilon x} - \delta_{a,m+\varepsilon y}) <P_a P_n> - J_{ab} <P_b^+ P_a> - \sum_n J_{nb} \bar{n} \delta_{ab} +$$
$$+ J_{ab} (\delta_{b,a+\varepsilon z} + \delta_{b,a-\varepsilon z}) <P_b^+ P_a> + \sum_n J'_{nb} (\delta_{b,n+\varepsilon z} + \delta_{b,n-\varepsilon z}) \bar{n} \cdot$$
$$\cdot \delta_{ab} = \int_{\infty}^{\infty} d\omega\, \omega\, S_{ab}(\omega)$$

Sada se izvrše furije transformacije oblika

4.14. $$I_{\vec{n}-\vec{m}} = \frac{1}{N} \sum_k I(\vec{k}) e^{i\vec{k}(\vec{n}-\vec{m})}$$

inverzna transformacija

furije - transformacije za Pauli operatore koje se uzimaju formalno date su izrazom:

$$P_n^+ = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q P_q^+ e^{-iqn} \quad i \quad P_n = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_q P_q e^{iqn}$$

tako da se dobija izraz:

$$4.15. \quad \sigma E_k = \sigma(\Gamma + \tfrac{1}{2} J_o - \tfrac{1}{2} J_k) + \sigma J'(\tfrac{1}{2}\alpha_k - 1) + \frac{1}{N} \sum_q \langle P_q^+ P_q \rangle \cdot$$

$$\left| J_{\vec{k}} - J_o - J_{\vec{k}-\vec{q}} + J_{\vec{q}} \right) + \frac{J'}{N} \sum_q \langle P_q^+ P_q \rangle \left| -\alpha(\vec{k}) - \alpha(\vec{q}) + 2\cos(k_z - q_z)a + 2 \right| -$$

$$- \frac{J'}{N} \sum_q \langle P_q P_{-q}^{-1} \rangle W_{\vec{q}}$$

gde je $\alpha(\vec{k}) = \cos k_x a + \cos k_y a$

$$W(\vec{q}) = (\cos q_x a - \cos q_y a) \cdot \frac{J'}{J}$$

$$\delta = J'/J$$

Poredjenjem izraza 4.15. sa istim dobijenim za izotropnim feromagnetik koji glasi

$$4.16 \quad \sigma E_k = \frac{\sigma}{2}(J_o - J_k) + \frac{1}{N} \sum_q \langle P_q P_q \rangle (J_{\vec{k}} - J_{\vec{q}} - J_o + J_{\vec{q}-\vec{k}}) + \sigma \mu H$$

vidimo da se pojavljuje član uz J' čemu je uzrok anizotropija. Ako je $J'=0$ izraz 4.15. prelazi u 4.16. Da bi našli izraz za disperziju potrebno je osloboditi se člana $\langle P_q P_{-q} \rangle$ koji se kao što se vidi pojavljuje u slučaju anizotropije feromagnetika. Zato je potrebno uvesti novu komutacionu relaciju pomoću koje ćemo se osloboditi člana $\langle P_q P_{-q} \rangle$.

Po definiciji srednje vrednosti bilo kojeg operatora može se napisati na sledeći način:

$$\langle \hat{\alpha} \rangle = T_n \hat{\alpha}\, e^{-\beta \hat{H}} = \sum_n \langle n | \hat{\alpha}\, e^{-\beta \hat{H}} | n \rangle$$

gde je T_n trag (ili špur) operatora i ima tu osobinu da je trag proizvoda invarijantan u odnosu na ciklične permutacije operatora 3 tj.

$$T_r \hat{A}\hat{B}\hat{C} = T_r \hat{B}\hat{C}\hat{A} = T_r \hat{C}\hat{A}\hat{B}$$

a srednja vrednost komutatora bilo koja dva operatora je po definiciji data izrazom

$$
\begin{aligned}
<[\hat{A},\hat{H}]> &= <\hat{A}\hat{H}> - <\hat{H}\hat{A}> = T_r\hat{A}\hat{H}e^{-\beta\hat{H}} - T_r\hat{H}\hat{A}e^{-\beta\hat{H}} \\
&= T_r\hat{A}\hat{H}e^{-\beta\hat{H}} - T_r\hat{A}e^{-\beta\hat{H}}\hat{H} = T_r\hat{A}\hat{H}e^{-\beta\hat{H}} - T_r\hat{A}\hat{H}e^{-\beta\hat{H}} = 0
\end{aligned}
$$

jer je $e^{-\beta H} \equiv \sum\limits_{k=o} \frac{1}{k!}\, \beta^k H^k = \sum \frac{1}{k!} \beta \hat{H}^k$

$$e^{-\hat{\beta}\hat{H}} = \hat{H}e^{-\beta\hat{H}}$$

Umesto operatora $\hat{A}$ može se staviti bilo koji drugi operator ili kao u ovom slučaju proizvod dva operatora na primer P_aP_b. Prema tome dobili smo novu komutacionu relaciju pomoću koje treba izračunati $<P_qP_{-q}>$, a to je $<[P_a,P_b,\hat{H}]> = 0$ 4.17

Da bi izračunali komutator $[P_aP_b,\hat{H}]$, i njegovu srednju vrednost koristimo ranije navedene opšte osobine komutatora i komutacione relacije za Pauli operatore date izrazom 2.15, 2.16 i 2.17. Hamiltonijan anizotropnog feromagnetika dat je izrazom 3.4, 3.5, 3.6 i 3.7, tako da se dobije izraz:

4.18.
$$
\begin{aligned}
[P_aP_b,H)] &= 2(\Gamma+\tfrac{1}{2}J_o-J')P_aP_b - \tfrac{1}{2}\sum_m J_{mb}P_aP_m - \tfrac{1}{2}\sum_m J_{am}P_mP_b \\
&+ \tfrac{1}{4}J'(P_aP_{b+\varepsilon x}+P_aP_{b-\varepsilon x}+P_aP_{b+\varepsilon y}+P_aP_{b-\varepsilon y}) + \tfrac{1}{4}J'(1-2P_a^+P_a)\cdot \\
&[(\delta_{a,b+\varepsilon x}+\delta_{b,a-\varepsilon x})+(\delta_{a,b+\varepsilon y}+\delta_{a,b-\varepsilon y})] + \tfrac{1}{4}J'(P_a^+P_{b+\varepsilon x}+P_a^+P_{b-\varepsilon x}+ \\
&+ P_a^+P_{b+\varepsilon y}+P_a^+P_{b-\varepsilon x}) + \tfrac{1}{4}J'(P_{a+\varepsilon x}P_b+P_{a-\varepsilon x}P_b+P_{a+\varepsilon y}P_b+P_{a-\varepsilon y}P_b) + \\
&+ \tfrac{1}{4}J'\cdot(P^+_{a+\varepsilon x}P_b+P^+_{a-\varepsilon x}P_b+P^+_{a+\varepsilon y}P_b+P^+_{a-\varepsilon y}P_b) - \tfrac{1}{2}J'P_b^+P_b(\delta_{a,b+\varepsilon x}+ \\
&+\delta_{a,b-\varepsilon x}+\delta_{a,b+\varepsilon y}-\delta_{a,b-\varepsilon x})
\end{aligned}
$$

U izrazu 4.18. zanemareni su članovi četvrtog reda. Nakon furije transformacija dobija konačno izraz za srednju vrednost 4.17.

$$4.19.\quad \langle[P_aP_b,H]\rangle = 2(\Gamma+\tfrac{1}{2}J_o-J')\langle P_{-q}P_q\rangle+\tfrac{1}{2}J'\langle P_{-q}P_q\rangle(\cos q_xa + \cos q_ya)$$

$$-\tfrac{1}{2}J_q\langle P_{-q}P_q\rangle+J\langle P_{-q}P_q\rangle(\cos q_xa+\cos q_ya)+\tfrac{1}{2}J'\langle P_q^+P_q\rangle(\cos q_xa-\cos q_ya)-$$

$$-\tfrac{1}{2}\cdot\langle P_{-q}P_q\rangle J_{(q)}+\tfrac{1}{2}J'(1-4\bar{n})(\cos q_xa-\cos q_ya)+\tfrac{1}{2}J'\langle P_q^+P_q\rangle\cdot$$

$$(\cos q_xa-\cos q_ya)$$

Izjednačavanjem izraza 4.19. sa nulom dobijamo izraz $\langle P_{-q}P_q\rangle$ koji je jednak.

$$4.20.\qquad \langle P_{-q}P_q\rangle = \frac{W(\vec{q}^{\,+})\,[\langle P_q^+P_q\rangle+(1-4\bar{n})]}{\Delta+\delta\,\alpha(\vec{q})-\gamma(\vec{q})}$$

Ovaj izraz se zamenjuje u jednačinu 4.16 tako da posle delenja celog izraza sa σ dobijamo zakon disperzije:

$$4.21.\quad E_k = (\Gamma+\tfrac{1}{2}J_o-\tfrac{1}{2}J_k)+J'(\tfrac{1}{2}\alpha(k)-1)+\frac{1}{N\sigma}\sum_q\langle P_q^+P_q\rangle$$

$$(J_{\vec{k}}-J_o-J_{\vec{k}-\vec{q}}+J_{\vec{q}})+\frac{J'}{N\sigma}\sum_q\langle P_q^+P_q\rangle[2-2\cos(k_z-q_z)-\alpha(k)-\alpha(q)]+$$

$$+\frac{2J'}{N\sigma}\sum_q\frac{\langle P_q^+P_q\rangle+(1-4\bar{n})}{\Delta+\delta\alpha(\vec{q})-\gamma(\vec{q})}W^2(q)$$

Ako u gornjem izrazu stavimo da je $J'=0$ dobićemo zakon disperzije za izotropni feromagnetik.

Ako pretpostavimo da je $\bar{n}\ll 1$ tada se $1/\sigma$ može pisati kao $\frac{1}{\sigma}=\frac{1}{2-\bar{n}}\sim 1-2\bar{n}$ tj. za $\bar{n}\ll 1$, $\sigma\sim 1$. Ako to uzmemo u obzir za zakon za disperziju ima sledeći oblik linearno po $\delta = J'/J$

$$4.22.\quad E_k = \Gamma+\tfrac{1}{2}(J_o-J_k)+J'(\tfrac{1}{2}\alpha_k-1)+\frac{1}{N}\sum_q\langle P_q^+P_q\rangle M(\vec{k},\vec{q})+$$

$$+\frac{J'}{N}\sum_q\langle P_q^+P_q\rangle M'(\vec{k},\vec{q})$$

Pretpostavimo da je $\delta = J'/J \ll 1$, ukupna energija elementarnih ekscitacija jednaka zbiru izotropne i energije koja se javlja usled anizotropije, tj.

$$4.23.\qquad E_k = E_o(k) + J'\,E_1(k)$$

Kako se srednja vrednost Pauli operatora može napisati u sledećem obliku:

$$<P_q^+ P_q> \simeq \frac{1}{e^{\frac{E_k}{\theta}} - 1} = \frac{e^{-E_k/\theta}}{1-e^{-E_k/\theta}} = e^{\frac{-E_k}{\theta}} \cdot \sum_{r=o}^{\infty} e^{\frac{-nE_k}{\theta}} =$$

$$= \sum_{n=o}^{\infty} e^{\frac{-(n+1)E_k}{\theta}} = \sum_{n=o}^{\infty} e^{\frac{-(n+1)}{\theta} E_o} \left(1 - \frac{(n+1)E_1 J'}{\theta}\right)$$

Izotropni deo energije elementarnih ekscitacija je

4.24. $$E_k(k) = \Gamma + \frac{1}{2}(J_o - J_k) + \frac{1}{N} \sum_q \frac{1}{e^{E_o/\theta} - 1} M(\vec{k},\vec{q})$$

a anizotropijni deo dat je sledećim izrazom:

$$E_1(\vec{k}) = \frac{1}{2}\alpha_k - 1 + \frac{1}{N}\sum_q \frac{1}{e^{E_o/\theta} - 1} M'(\vec{k},\vec{q}) - \frac{1}{N} \sum_q \sum_{n=o}^{\infty} \frac{(n+1)}{\theta} E_1(\vec{q}) \cdot$$

$$\cdot\, e^{-\frac{(n+1)}{\theta} E_o(\vec{q})} M(\vec{k},\vec{q})$$

Kako je

$$\sum_{n=o}^{\infty} \frac{(n+1)}{\theta} e^{-\frac{(n+1)}{\theta} E_o(q)} = \frac{1}{\theta} \frac{e^{E_o/\theta}}{(e^{E_o/\theta} - 1)^2}$$

4.25. $$E_1(\vec{k}) = \frac{1}{2}\alpha_k - 1 + \frac{1}{N}\sum_q \frac{1}{e^{E_o/\theta} - 1} M'(\vec{k},\vec{q}) - \frac{1}{N}\sum_q \frac{1}{\theta} \frac{e^{E_o/\theta}}{(e^{E_o/\theta} - 1)^2} E_1(\vec{q}) M(\vec{k},\vec{q})$$

Iz jednačina 4.24, i 4.25 se vidi da energija elementarnih ekscitacija zavisi od temperature.

U sledećem radu biće ukratko opisana magnetizacija i energijski procep anizotropnog feromagnetika.

4.2. Magnetizacija anizotropnog feromagnetika

Kako je već rečeno opšti izraz za relativnu magnetizaciju po čvoru rešetke za spin S=1/2 je

$$\sigma = 1 - 2 \langle P_n^+ P_n^- \rangle = 1 - 2 \langle \bar{n} \rangle$$

Izračunavanje magnetizacije pomoću Grinovih funkcija izraženih preko Pauli operatora ne daje dovoljno tačne rezultate. Zato se vrši prelaz od Pauli operatora na Boze operatorepo približnim reprezentacijama Dajson, Holštajn i Primakova što daje približno dobre rezultate i pokazuje da je prva korekcija magnetizacije do interakcije spinskih talasa proporcionalna sa T^4. Ovaj rad ne obuhvata detaljno izvodjenje izraze za ukupnu magnetizaciju pomoću metoda Grinovih funkcija, nego ćemo ukratko opisati račun.

Relativna magnetizacija izradjena preko Boze operatora |9|

$$\sigma = 1 - \frac{2}{N} \sum_{\vec{k}} \langle B_{\vec{k}}^+ B_{\vec{k}} \rangle$$

pa je relativna magnetizacija anizotropnog feromagnetika

$$\sigma = 1 - \Delta\sigma_o - \Delta\sigma(\theta)$$

gde je $\Delta\sigma_o$ - devijacija magnetizacije na apsolutnoj nuli

$\Delta\sigma(\theta)$ - daje zavisnost magnetizacije od temperature.

U linearnoj aproksimaciji po δ sledi da je devijacija magnetizacije na $T=0K$ jednaka nuli.

Dalje se $\Delta\sigma(\theta)$ može napisati kao razlika magnetizacije izotropnog feromagnetika (Dajsonov rezultat) i popravi usled anizotropije:

$$\Delta\sigma(\theta) = \Delta\sigma_o(\theta) - \delta\Delta\sigma_a(\theta)$$

Postupak za izračunavanje $\Delta\sigma_o(\theta)$ i $\Delta\sigma_a(\theta)$ pokazan je na primeru Dajsonovog rezultata $\Delta\sigma_o(\theta)$, procedura je potpuno analogna i za $\Delta\sigma_a(\theta)$ |9|.

Ukupna promena magnetizacije anizotropnog feromagnetika data je izrazom

$$\sigma = 1-2z_{3/2}(\alpha)(1-\delta)\rho^{3/2} - \frac{3\pi}{2} z_{5/2}(\alpha)(1-\frac{5}{3}\delta)\rho^{5/2} - \frac{33}{16}\pi^2 z_{7/2}(\alpha)\cdot$$

$$(1-\frac{119}{66}\delta)\rho^{1/2} - 6\pi z_{3/2}(\alpha)z_{5/2}(\alpha)\rho^4 - \delta\big[z_{1/2}(\alpha)z_{5/2}(\alpha) +$$

$$+ z^2_{3/2}(\alpha)\big]\rho^3 + \delta\big[\frac{5}{4}\pi z_{1/2}(\alpha)z_{7/2}(\alpha) + \frac{143}{8} z_{3/2}(\alpha)\cdot z_{5/2}(\alpha)\big]\rho^4 .$$

Svi koeficijenti u razvoju renormalizovani su usled anizotropije u odnosu na Dajsonov rezultat. Član proporcionalan T^3 je posledica anizotropije. U jednačini su

$$\rho = \frac{\theta'}{2\pi} \quad i \quad z_p(\alpha) = \sum_n \frac{e^{-(n+1)^\alpha}}{(n+1)^p} \quad i \quad \alpha = \frac{\Gamma}{\theta J}$$

4.3. Energetski procep anizotropnog feromagnetika

Realne magnetike karakteriše njihova anizotropija. Hajzenbergov feromagnetik je sam po sebi izotropan (u odsustvu spoljašnjeg polja) i stoga se formulišu različite varijante anizotropnog Hajzenbergovog modela. Sa teorijskog stanovišta ovakvi modeli su interesantni jer za njih važi Goldsonova teorema koja glasi:

Energija elementarnih ekscitacija ne mora obavezno da teži nuli kada talasni vektor ekscitacije teži nuli.

Neka je $H=0$, $\Gamma=0$, $\Delta \sim \tilde{\Delta}$

$$\frac{E_o}{J} \equiv \frac{\delta}{1-2n}\Big[\frac{1}{N}\sum_k \bar{n}_k(2\cos k_z a - \cos k_x a - \cos k_y a) -$$

$$- \frac{1}{N}\sum_k \langle P_k P_{-k}\rangle \cdot (\cos k_x a - \cos k_y a)\Big]$$

Kako je $J'/J = \delta$ iz jednačine sledi da je u slučajukada je $J'=0$ i $E_o=0$. Medjutim, kada je $J'\neq 0$, energetski procep je različit od nule i proporcionalan δ^2 , za prvi član dokaz je sledeći:

$$\frac{\bar{n}k}{1-2\bar{n}} = \frac{1}{e^{(k)/\theta}-1} = \frac{1}{e^{E_o/\theta}\, e^{\frac{E-1}{\theta}}-1} = \frac{1}{e^{E_o/\theta}-1} \cdot \frac{1}{1+\frac{E_1}{\theta}\,\frac{e^{E_o/\theta}}{e^{E_o/\theta}-1}}$$

$$= \frac{1}{e^{E_o/\theta}-1}\left\{1-\frac{E_1}{\theta}\,\frac{e^{E_o/\theta}}{e^{E_o/\theta}-1}\right\}$$

$$\frac{1}{N}\sum_k \frac{n_k}{1-2\bar{n}}\,(2\cos k_z a-\cos k_x a-\cos k_y a) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{2\cos k_z a-\cos k_x a-\cos k_y a}{e^{E_o/\theta}-1}$$
$$-\frac{\delta}{N}\sum_k \frac{2\cos k_z a-\cos k_x a-\cos k_y a}{(e^{E_o/\theta}-1)^2}\,\frac{E_1}{\theta}\,e^{E_o/\theta} \sim \delta$$

za drugi član

$$\frac{1}{N}\sum_k \langle P_k P_{-k}\rangle(\cos k_x a-\cos k_y a) = \frac{1}{N}\sum_k \frac{W(k)\,(1-4\bar{n}+n_k)}{\tilde{\Delta}+\delta\alpha(k)-\gamma(k)}\,(\cos k_x a -$$
$$-\cos k_v a) = -\frac{\delta}{2}\,\frac{1}{N}\sum_k \frac{(\cos k_x a-\cos k_y a)^2}{\tilde{\Delta}+\alpha(k)-\gamma(k)} \sim \delta$$

te konačno sledi da je $\frac{E_o}{J} \sim \delta^2$ u najnižoj aproksimaciji što je u skladu sa ranije dobijenim rezultatima (8) i potvrdjuje Goldstanovu teoremu.

ZAKLJUČAK

Cilj ovog rada je bio prvenstveno metodološki tj. da se pokaže kako se tehnika spektralne intenzivnosti može primeniti na Hajzenbergov anizotropni model, za izračunavanje zakona disperzije, magnetizacije i energijskog procepa. Pokazano je da se već sa zadržavanjem prva dva momenta, mogu dobiti veoma dobri rezultati kao i metodom funkcije Grina, pri čemu anizotropija zahteva primenu dodatnih identiteta. Svi rezultati su u kvantitativnom slaganju sa rezultatima dobijenim drugim metodama a račun je tehnički posmatrano daleko brži i elegantniji. Ovo ukazuje, da bi ovaj metod bio izuzetno pogodan za primenu viših aproksimacija.

LITERATURA

|1| Dj.Musicki, Uvod u teorijsku fiziku III, IRO "Gradjevinska knjiga" (1981).

|2| C.Kittel, Uvod u fiziku čvrstog stanja (1970).

|3| B.Tošić, Statistička fizika PMF Novi Sad (1978).

|4| A.Анималу, Квантовая твори кристаллических твердих тел. "МИР" , Москва (1981).

|5| V.Sajfert, Diplomski rad, PMF Novi Sad (1976).

|6| M.J.Škrinjar, D.V.Kapor and J.P.Šetrajčić, Phys. stat. sol. (b) 103. 559 (1981).

|7| M.J.Škrinjar, D.V.Kapor i J.P.Šetrajčić, Nisko temperatursko ponašanje Hajzenbergovog feromagnetika u metodu spektralne gustine ; Zbornik radova PMF Novi Sad (1978).

|8| M.J.Škrinjar, D.V.Kapor and J.P.Setrajčić, Phys. stat. sol. (b) k 91, (1981).

|9| Z.Stepanić, Diplomski rad, PMF Novi Sad (1980).

|10| E.Belorizky, R. Casalegno, P.Fries and J.J.Niez, Physique 39, 776 (1978).

|11| E.Belorizky, R.Casalegno and J.J.Niez, Phys. stat. sol. (b) 102, 365 (1980).