U N I V E R Z I T E T U N O V O M S A D U
P R I R O D N O - M A T E M A T I Č K I F A K U L T E T
Katedra za fiziku

D I P L O M S K I R A D

T E R M O D I N A M I Č K A A N A L I Z A S-d-M O D E L A

KANDIDAT
Rakonjac Ostoja

MENTOR
Dr. Bratislav Tošić

Novi Sad, decembar 1973.

Zahvaljujem se dr. Bratislavu Tošiću, na pomoći izbora teme, korisnim i konkretnim savetima prilikom izrade ovoga rada.

U V O D

Cilj ovog rada je da se ispitaju uticaji lokalizovanih spinova na ponašanje valentnih elektrona u feromagnetiku, a takodje i one promene u sistemu lokalizovanih spinova do kojih dolazi usled interakcije ovih spinova sa spinovima valentnih elektrona.

Cela analiza biće izvršena na bazi S-D-modela Vonsovskog. Od karakteristika valentnih elektrona mi ćemo ispitivati njihov srednji slobodni put izmedju dva sudara sa lokalizovanim spinovima i to za one valentne elektrone čiji je impuls blizak graničnom impulsu fermi sfere. Kao što je poznato ovi valentni elektroni odgovorni su za fenomen superprovodljivosti, pa izračunavanje njihovog slobodnog puta može da da dopunsku informaciju o tome kako magnetne osobine materijala utiču na njegovo super-konduktivno svojstvo.

Za sistem lokalizovanih spinova u granicama S-D-modela mi ćemo izračunati devijacije zakona disperzije za magnone koje nastaju usled činjenice da spinski talasi interaguju sa valentnim elektronima. Na osnovu dobijenog zakona disperzije ispitivaćemo ponašanje feromagnetika u okolini temperature prelaza.

I GLAVA

ELEMENTI TEORIJE MAGNETIZMA I S-D MODEL

1. Opšte o magnetizmu

Podela magnetnih materijala se može izvršiti na osnovu magnetne susceptibilnosti χ. Magnetna susceptibilnost se definiše kao koeficijent proporcionalnosti izmedju magnetnog momenta kristala $\vec{M}$ i spoljašnjeg magnetnog polja $\vec{\mathcal{H}}$ u kome se magnetik nalazi.

$$\chi = \frac{\partial M}{\partial H}$$

Ako je spoljašnje magnetno polje $\vec{\mathcal{H}}$ paralelno sa magnetnim momentom $\vec{M}$, magnetna susceptibilnost je skalar.

$$M = \chi \mathcal{H} \qquad (\bar{I}\ 1.0)$$

Izraz(I 1. 0)predstavlja vezu izmedju M, χ i $\mathcal{H}$.

Ako je($\chi < 0$)negativna veličina magnetni materijal se naziva dijamagnetik. Za pozitivnu vrednost magnetne susceptibilnosti χ razlikujemo dva slučaja:

a) ako je χ pozitivna i mala veličina magnetni materijal je paramagnetik

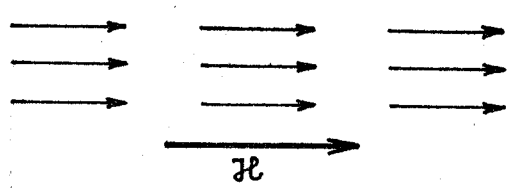
b) ako je χ pozitivna i velika veličina magnetni materijal se naziva feromagnetik. Na osnovu magnetne susceptibilnosti χ izvršena je gruba podela magnetnih materijala u tri osnovne klase koje se bitno razlikuju. Bolju podelu magnetnih materijala možemo izvršiti tek posle mikroskopske analize kristala i njegovih sastavnih elemenata. Da bismo izvršili mikroskopsku analizu kristala pre svega treba objasniti koji su atomski fenomeni odgovorni za pojavu magnetizma tj. objasniti prirodu magnetizma. Prvu teoriju o prirodi magnetizma dao je Veber.

Po njegovoj teoriji magnet pretstavlja skup uredjenih elementarnih magneta i da sve magnetne pojave nastaju kao posledica razuredjenja sistema elementarnih magneta. Promena orijentacije elementarnih magneta nastaje usled dejstva spoljašnjeg polja ili neke spoljne sile. Veberova teorija nije objasnila suštinu elementarnih magneta na osnovu atomske strukture sastavnih delova kristala u čemu se i ogleda njen nedostatak. Dobra osobina Veberove teorije je to da magnet predstavlja skup uredjenih elemenata (objekata) koji se sa povišenjem temperature ili nekim spoljnim mehaničkim dejstvom može "RAZUREDITI". Pojave i fenomeni magnetizma sa teorijske tačke gledišta razmatraju se u granicama opštih order-disorder teorija. Prihvatajući Veberovu teoriju o magnetizmu kao sistemu uredjenih elemenata savremena mikroteorija magnetizma imala je zadatak da utvrdi koji su ti elementi i kakva je njihova priroda sila koje izmedju njih deluju. Na osnovu eksperimenata je utvrdjeno da su za pojavu magnetizma odgovorni elektroni unutrašnjih nepopunjenih ljuski (spinovi elektrona nepopunjenih ljuski) i to spinovi elektrona nepopunjenih 3d ljuski za jake magnetike (Fe i Ni), i spinovi elektrona nepopunjenih 4f ljuski za slabe feromagnetike (retke zemlje). Eksperimentalno je utvrdjeno da spinovi elektrona nepopunjenih ljuski 3d i 4f, kada su atomi vezani u kristal obrazuju jedan efektivni spin koji ne mora da bude jednak sumi svih spinova elektrona u nepopunjenog ljusci. Ovaj efektivni spin odredjuje se za svaki kristal eksperimentalno. Savremena teorija magnetizma bazira na hipotezi koja kaže da efektivni spin predstavlja skup uredjenih elemenata koji odgovara Veberovim elementarnim magnetima. Ova hipoteza ekseperimentalno je potvrdjena. Drugo pitanje savremene mikro teorije magnetizma je pitanje prirode interakcije izmedju spinova elektrona nepopunjenih ljuski 3d i 4f. Prva ideja je bila da se ove interakcije shvate kao dipol--dipolne interakcije magnetnih momenata elektrona nepopunjenih ljuski. Medjutim, ispostavilo se da konstanta dipol-dipolne interakcije je reda 10 K_b(K_b Bolcmanova konstanta) i zbog toga ova ideja nije mogla da se održi. Na osnovu eksperimenata je pokazano da su tačke prelaza za fero magnetike reda 100 K_b za lantanide i 1000K_b za F_e, C_o, N_i (jaki fero magnetici). Pošto interakcije dovode do uredjenosti skupa spinova, tačka prelaza će biti istog reda kao i konstanta interakcije. Ako bi ideja o dipol-dipolnim interakcijama bila zadovoljavajuća onda ne bi smo imali ni jedan magnetni materijal sa tačkom prelaza višom od 10°-20°K, a ovo protivureči eksperimentalnim podacima. Postojala je ideja koja se zasniva na mišljenju da su za magnetizam odgovorne električne sile izmedju elektrona tj. da su sile interakcije izmedju spinova čisto ~~van~~kvantnomehaničkog porekla. Ove sile dolaze usled činjenice da elektrone ne možemo medjusobno razlikovati. Da bi bio zadovoljen Paulijev princip isključenja elektroni moraju biti opisani antisimetričnim funkcijama. Na primer talasna funkcija za sistem od 2 elektrona mora biti anti simetrična kombinacija talasnih funkcija svakog od ova dva elektrona. Matrični element energije interakcije usled antisimetričnih talasnih funkcija elektrona dobija jedan dopunski član koji se klasično ne može objasniti koji se zove energija izmene. Energija izmene je reda veličine od 100-1000K_b.

Prema tome sile interakcije izmedju spinova su čisto kvantno-mehaničkog porekla što je i odgovarala eksperimentalnim podatcima koji su dobijeni na osnovu ispitivanja tačaka prelaza. Prema ovoj ideji možemo reći da je magnet sistem uredjenih spinova koji izmedju sebe interaguju kvantnomehaničkim silama izmene. Na apsolutnoj nuli svi spinovi u kristalu su medjusobno paralelni.Taj pravac u kome su spinovi upereni naziva se osa kvantizacije magneta. Povišenjem temperature ili dejstvom neke mehaničke sile, uredjeni sistem spinova odstupa od svog prvobitnog pravca, tj. od ose kvantizacije. Na osnovu ideje da magnetizam predstavlja sistem uredjenih spinova izvršena je finija podela fero magnetnih materijala. Ako magnetni kristal ima prostu rešetku sastavljenu od spinova iste veličine onda se takav kristal naziva feromagnetik. Ako magnetni kristal sadrži dve podrešetke koje imaju spinove iste veličine ali antiparalelne kristal se zove antiferomagnetik. Ferimagnetici pretstavljaju magnetne kristale sa više podrešetki kod kojih su spinovi različiti i različito orijentisani. Ako se ferimagnetik sastoji od više podrešetki kod koga su spinovi u svim podrešetkama medju sobom paralelni naziva se feromagnetik sa "n" podrešetki. Kod feromagnetika narušava se uredjenost spinova na Kirijevoj temperaturi. Ako se koriste kvaziklasične aproksimacije modele jakih magnetnih materijala pretstavićemo na sledeći način.

FEROMAGNETICI

Za temperature koje su manje od Kirijeve temperature $T<T_c$ svi spinovi su orijentisani u jednom pravcu, pa je resultujući magnetni moment veliki. Kada magnetno polje $\vec{\mathcal{H}}$ ne postoji pravac magnetnog momenta $\vec{M}$ nije odredjen (fiksiran). Vektori $\vec{M}$ i $\vec{\mathcal{H}}$ su kolinearni kada se feromagnet nadje u spoljašnjem $\vec{\mathcal{H}}$ polju sl. 1



(SL. 1)

Za temperature $T>T_c$ feromagnetik se ponaša kao paramagnetik a χ je odredjena Kiri-Vajsovim zakonom $\chi = \frac{const}{T-T_c}$

Spontana magnetizacija za $T\leq T_c$ je data izrazom

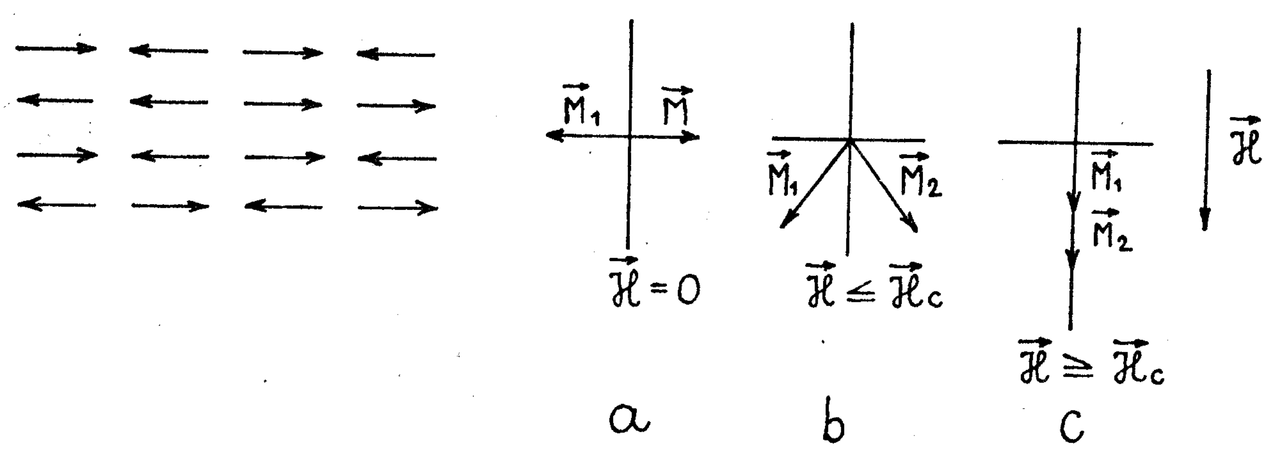
$$M(T) \cong const\sqrt{1-\frac{T}{T_c}} \qquad kada \quad T \to 0 \implies$$

$$M(T) = M_0(1 - A_1 T^{3/2} - A_2 T^{5/2} \ldots)$$

gde je A_i neke konstante a M_0 magnetizacija zasićenja.

ANTIFEROMAGNETICI

Raspored spinova kod antiferomagnetika (prema hipotezi Nela) može se predstaviti kao sprega dve ili više feromagnetnih podrešetki (sl.2).

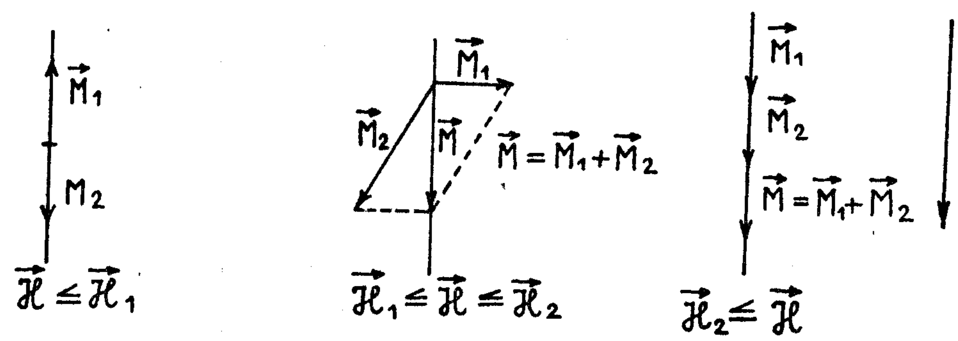


SL. 2.

Sl. 2 predstavlja šematski prikaz antiferomagnetika sa dve podrešetke. Rezultujuća magnetizacija za $\vec{\mathcal{H}}=0$ je 0(sl.2a). Za vrednost polja $\vec{\mathcal{H}}<\vec{\mathcal{H}}_c$($H_c$ kritično polje) magnetizacija nije usmerena u pravcu polja već je rezultujuća magnetizacija kolinarna sa poljem. Za $\vec{\mathcal{H}}=\vec{\mathcal{H}}_c$ magnetizacija podrešetki je u pravcu polja a rezultujuća magnetizacija je jednaka algebarskom zbiru. Pri $T=T_n$ (T_n Nelova temperatura) antiferomagnetici imaju maksimalnu susceptibilnost i strogo zavisi od temperature.

FERIMAGNETICI

Po Nelovoj hipotezi ferimagnetici se karakterišu postojanjem nekoliko podrešetki sa rezultujućim magnetnim momentom različitim od nule koji se sastoji od različitog broja levih i desnih čvorova kod koga su spinovi različitih veličina. Raspored momenata podrešetki je nekolinaran.



SL. 3

Na (Sl.3) je pokazano kako se ferimagnetik ponaša u spoljašnjem $\vec{\mathcal{H}}$ polju za dve podrešetke sa rezultujućim momentima $\vec{M}_1$ i $\vec{M}_2$. $\vec{H}_1$ i $\vec{H}_2$ su kritične vrednosti magnetnog polja. Ovde je zanemarena spontana magnetizacija. Kod ferimagnetika koji sadrže više od dve podrešetke spontana magnetizacija može da padne na nulu pre Kirijeve tačke, a to je tzv. temperatura kompezacije. Na temperaturi $T>T_c$ ferimagnetici se ponašaju kao paramagnetici, a zavisnost susceptibilnosti χ od temperature je data Kiri-Nelovim zakonom $\chi^{-1}=\chi_0^{-1}+\frac{T}{C}-\frac{\Delta}{T-T_c}$

gde su χ_0, Δ i C konstante.

I 2. HAJZENBERGOV MODEL I BLOHOVA APROKSIMACIJA

Pošto magnet pretstavlja sistem uredjenih spinova raznih čvorova kristalne rešetke neophodno je spinske operatore označiti sa indeksom koji označava čvor rešetke u kome se nalazi atom. Ako sa $\hat{\vec{S}}_{\vec{n}}$ i $\hat{\vec{S}}_{\vec{m}}$ označimo spinove dva čvora kristalne rešetke, energija interakcije izmedju spina je proporcionalna skalarnom proizvodu spinova $\hat{\vec{S}}_{\vec{n}}$ i $\hat{\vec{S}}_{\vec{m}}$ (pošto je energija skalar).
Za dva čvora energija interakcije

$$\hat{H}_{\vec{n}\vec{m}} = -\frac{1}{2} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{\vec{S}}_{\vec{n}} \hat{\vec{S}}_{\vec{m}} \qquad (\text{I } 2.1)$$

a za ceo kristal hamiltonijan će biti jednak sumi po svim čvorovima rešetke.

$$\hat{H}_{\vec{n}\vec{m}} = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{\vec{S}}_{\vec{n}} \hat{\vec{S}}_{\vec{m}} \qquad (\text{I } 2.2)$$

Vrednost $\frac{1}{2}$ označava da je interakcija u smeru $\vec{n}$-$\vec{m}$ ista kao i interakcija u smeru $\overrightarrow{mn}$ pa bih bez vrednosti $\frac{1}{2}$ energija bila udvojena. Znak (~~crte~~ minus) je uzet zato da bi sistem osnovnog stanja imao negativnu energiju tj. sistem se nalazi u potecijalnoj jami a ne na potencijalnom bedemu. Pošto spin na mestu $\vec{n}$ interaguje u smeru $\vec{m}$ istom silom kao i spin u mestu $\vec{m}$ u smeru $\vec{n}$ integral izmene $I_{\overrightarrow{nm}}$ je simetrična funkcija pa se može napisati da je $I_{\overrightarrow{nm}}=I_{\overrightarrow{mn}}$.

Integrali izmene mogu se računati na osnovu poznavanja talasnih funkcija elektrona nepopunjenih ljuski, ali ovakvi pokušaji nisu dali zadovoljavajuće rezultate zbog deformisanosti talasnih funkcija 3d elektrona. Pošto ovakvi pokušaji nisu dali zadovoljavajuće rezultate za integrale izmene ($I_{\overrightarrow{nm}}$) oni se u teoriji uzimaju kao fenomenološki parametri reda veličine $100K_b$ do $1000K_b$.

Na osnovu eksperimentalnih istraživanja smatra se da integrali izmene opadaju eksponencijalno sa povećanjem rastojanja izmedju čvorova rešetke $(\vec{n}-\vec{m})$, što znači da je aproksimacija najbližih suseda (najbližih čvorova) u teoriji magnetizma opravdana. Ako se posmatrani sistem nalazi u magnetnom polju $\vec{\mathcal{H}}$ svaki čvor pored energije koja potiče od spina imaće i energiju koja potiče od magnetnog polja. Ova energija koja potiče od magnetnog polja naziva se dodatna energija.

Vrednost dodatne energije je $-\mu_b \hat{\vec{S}}_{\vec{n}} \vec{\mathcal{H}}$. Pošto se spinovi uvek orijentišu duž magnetnog polja $\vec{\mathcal{H}}$ to će projekcija spina imati maksimalnu vrednost $\vec{S}_{\vec{n}} = S^z_{\vec{n}}$ ($\vec{\mathcal{H}}$ je u pravcu Z-ose) sledi.

$$-\mu_b \vec{S}_{\vec{n}} \vec{\mathcal{H}} = -\mu_b S^z_{\vec{n}} \vec{\mathcal{H}}$$

Ukupna vrednost dodatne energije za kristal (posmatrani sistem) je jednaka sumi po svim čvorovima rešetki.

$$\sum_{\vec{n}} \mu_b S^z_{\vec{n}} \mathcal{H}$$

Ukupni hamiltonijan za sistem spinova koji se nalazi u magnetnom polju $\vec{\mathcal{H}}$ pri čemu je Z-osa, osa kvantizacije ima oblik

$$\hat{H} = -\mu_b \vec{\mathcal{H}} \sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{\vec{S}}_{\vec{n}} \hat{\vec{S}}_{\vec{m}} \qquad (\text{I } 2.3)$$

Izraz (I 2. 3) naziva se Hajzenbergov model feromagnetnog sistema. Hamiltonijan (I 2. 3) možemo izraziti preko operatora S^+ i S^- koji menjaju vrednost Z-projekcije. Pošto se zna da je

$$S^+ = S^x + i S^y \; ; \; S^- = S^x - i S^y \qquad (\text{I } 2.4)$$

iz kojih sledi da je

$$S^x = \frac{S^+ + S^-}{2} \; ; \; S^y = \frac{S^+ - S^-}{2i} \qquad (\text{I } 2.5)$$

Hamiltonijan možemo transformisati što ćemo zameniti izraze (I 2.4 i I 2. 5) u formulu (I 2. 3).

$$\hat{H} = -\mu_b \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} S^z_{\vec{n}} - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \hat{\vec{S}}_{\vec{n}} \hat{\vec{S}}_{\vec{m}}$$

$$S^z_{\vec{n}} = S - (S - S^z_{\vec{n}}) \quad a \quad \vec{S}_{\vec{n}} = S^x \vec{i} + S^y \vec{j} + S^z \vec{k}$$

$$H = -\mu_b \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} [S - (S - S^z_{\vec{n}})] - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S^x_{\vec{n}} S^x_{\vec{m}} + S^y_{\vec{n}} S^y_{\vec{m}} + S^z_{\vec{n}} S^z_{\vec{m}})$$

$$= -\mu_b \mathcal{H} S \sum_{\vec{n}} 1 + \mu_b \mathcal{H} \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}}) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} \left[\frac{(S^+_{\vec{n}} + S^-_{\vec{n}})(S^+_{\vec{m}} + S^-_{\vec{m}}) - (S^+_{\vec{n}} - S^-_{\vec{n}})(S^+_{\vec{m}} - S^-_{\vec{m}})}{4} \right] -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} [S - (S - S^z_{\vec{n}})][S - (S - S^z_{\vec{m}})]$$

Kada se sve sredi dobija se vrednost za $\hat{H}$

$$H = -\mu_b \mathcal{H} S \sum_{\vec{n}} 1 - \frac{1}{2} S^2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} + \frac{S}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}}) +$$

$$+ \frac{S}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{m}}) - \frac{1}{4} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + S^-_{\vec{m}} S^+_{\vec{n}}) -$$

$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}})(S - S^z_{\vec{m}}) \qquad (I\ 2.6)$$

Pošto je $\sum_{\vec{n}} 1 = N$, gde je N broj atoma u kristalu.

a) $\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}-\vec{m}} = \sum_{\vec{n}\vec{l}} I_{\vec{l}} = \sum_{\vec{l}} I_{\vec{l}} \sum_{\vec{n}} 1 = N \sum_{\vec{l}} I_{\vec{l}} = N J_0 \qquad \vec{l} = \vec{n} - \vec{m}$

b) $\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}}) = \sum_{\vec{n}\vec{l}} I_{\vec{l}} (S - S^z_{\vec{n}}) = \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}}) \sum_{\vec{l}} I_{\vec{l}} = \underline{\underline{J_0 \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}})}}$

c) $\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{m}}) = J_0 \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}})$
$\vec{n} \rightleftarrows \vec{m}$

d) $\sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + S^-_{\vec{m}} S^+_{\vec{n}}) = \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{m}} S^+_{\vec{n}} =$
$\vec{m} \rightleftarrows \vec{n}$

$$= \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} + \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{m}\vec{n}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} = \qquad I_{\vec{n}\vec{m}} = I_{\vec{m}\vec{n}}$$

$$= 2 \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}}$$

Zamenom izraza a, b, c i d u formulu (I 2. 6) konačno dobijamo hamiltonijan

$$H = H_0 + H_2 + H_4$$

gde je

$$H_0 = -N\left(\mu_b \mathcal{H} S + \frac{1}{2} J_0 S^2\right) \qquad (\text{I } 2.7)$$

$$H_2 = (\mu_b \mathcal{H} + S J_0) \sum_{\vec{n}} (S - S^z_{\vec{n}}) - \frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} S^-_{\vec{n}} S^+_{\vec{m}} \qquad (\text{I } 2.8)$$

$$H_4 = -\frac{1}{2} \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} (S - S^z_{\vec{n}})(S - S^z_{\vec{m}}) \qquad (\text{I } 2.9)$$

Posle proračuna i sredjivanja dobili smo hamiltonijan feromagnetika izražen preko spinskih operatora kreacije i anihilacije S^+ i S^-. H_0 je energija osnovnog stanja feromagnetika, tj. ona energija kada su sve Z-projekcije u svim čvorovima jednake. Operator $(S - S^z_{\vec{n}})$ daje nam meru odstupanja Z-projekcije od njene maksimalne vrednosti. Operatori S^+ i S^- kada se primene na neku funkciju stanja $(S - n)$ povećavaju i smanjuju vrednost Z-projekcije

$$S^+ | S - n > \sim | S - n + 1 >$$

$$S^- | S - n > \sim | S - n - 1 >$$

Svojstvene vrednosti projekcije S_z mogu biti $S; S-1; S-2 \ldots -S+2; -S+1; -S$ što ih ukupno može biti $2S+1$ vrednosti. Komutacione relacije za operatore S^+ i S^- mogu se izraziti na sledeći način

$$[S^+_{\vec{n}}, S^-_{\vec{m}}] = 2 S^z_{\vec{n}} \, \delta_{\vec{n}\vec{m}} \qquad (\mathrm{I}\ 2.10)$$

Komutacione relacije za spinske operatore nezadovoljavaju ni bozonske ni fermionske, pa se uvodi Blohova aproksimacija pomoću koje spinske operatore zamenjujemo Boze operatorima B^+ i B. Izrazimo sada S^+, S^- i $S-S^z$ preko Boze operatora na sledeći način

$$S^+ = \sqrt{2S}\, B \qquad S^- = \sqrt{2S}\, B^+ \qquad S - S^z = B^+ B \qquad (\mathrm{I}\ 2.11)$$

Zamenom izraza (I 2. 11) u hamiltonijanu Hajzenbergovog modela (spinski hamiltonijan) uz zanemarivanje H_4 dobićemo hamiltonijan u Blohovoj aproksimaciji," Bozonski hamiltonijan"

$$H = H_0 + H_2$$

$$H = (\mu_b \mathcal{H} + SJ_0) \sum_{\vec{n}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{n}} - S \sum_{\vec{n}\vec{m}} I_{\vec{n}\vec{m}} B^+_{\vec{n}} B_{\vec{m}} \qquad (\mathrm{I}\ 2.12)$$

Pošto je maksimalna vrednost Z-projekcije S a minimalna -S operator $S-S^z$ može imati sledeće vrednosti 0,1,2,3, ... 2S. Bozonski okupacioni broj B^+B uzima vrednosti 0,1,2,3 ...,∞ do beskonačno. Prema tome ako je Bozonski okupacioni broj B^+B $B^+B \leq 2S$ operator $S-S^z$ može da uzima vrednosti 0,1,2,3. .. 2S. Za vrednosti $B^+B > 2S$ operator $S-S^z$ dobija vrednosti 2S + 1, 2S + 2, 2S + 3 ...... ∞ ali one ne postoje. Na niskim temperaturama Blohova aproksimacija je dobra aproksimacija jer se pobudjenost magnetnog kristala meri brojem Bozona u njemu, a Bozonski okupacioni brojevi uzimaju najmanje vrednosti 0,1,2,3 za sistem koji je slabo ekscitiran (niske temperature).

Za sistem koji je jako ekscitiran (visoke temperature) Bozonski okupacioni broj uzima visoke vrednosti koji vode nepostojećim vrednostima operatora $S-S^z$ (nepostojeće vrednosti su 2S +1, 2S + 2, 2S + 3, 2S + 4 itd.), pa zato na visokim temperaturama Blochova aproksimacija ne sme da se primeni.

I 3. S-D MODEL VONSOVSKOG

S-D model je predložio(S.V. Vonsovski) pa je i dobio ime model Vonsovskog. Ovaj model razmatra dve grupe nivoa elektronskog sistema i to d ili f nivo elektrona nepopunjenih unutrašnjih ljuski koji su odgovorni za magnetizam i S nivo valentnih elektrona. Interakcija elektrona koji se nalaze na d ili f nivou sa elektronima koji se nalaze na s nivou razmatraćemo kao mali poremećaj (perturbaciju). Uz ove pretpostavke hamiltonijan posmatranog sistema možemo napisati u sledećem obliku

$$\hat{H} = \hat{H}_{dd} + \hat{H}_{ss} + \hat{H}_{sd} \qquad (\text{I } 3.1)$$

gde je $\hat{H}_{dd}$ operator energije d-elektrona $\hat{H}_{ss}$ operator energije s elektrona i $\hat{H}_{sd}$ operator interakcije s i d elektrona

$$\hat{H}_{dd} = -\frac{1}{2}\sum_{f_1 f_2} I(f_1, f_2)(S_{f_1}, S_{f_2}) \qquad (\text{I } 3.2)$$

$$\hat{H}_{ss} = \sum_{\nu\sigma} E_{\nu\sigma}\, a^{+}_{\nu\sigma}\, a_{\nu\sigma} \qquad (\text{I } 3.3)$$

$$\hat{H}_{sd} = -\frac{1}{2N}\sum_{\nu, f} B(\nu_1 - \nu_2) e^{-i(\nu_1 - \nu_2, f)} \Big\{ S^{z}_{f}\big[a^{+}_{\nu_1}(-\tfrac{1}{2}) a_{\nu_2}(\tfrac{1}{2}) - a^{+}_{\nu_1}(\tfrac{1}{2}) a_{\nu_2}(-\tfrac{1}{2})\big] + S^{x}_{f}\big[a^{+}_{\nu_1}(-\tfrac{1}{2}) a_{\nu_2}(\tfrac{1}{2}) + a^{+}_{\nu_1}(\tfrac{1}{2}) a_{\nu_2}(-\tfrac{1}{2})\big] + i S^{y}_{f}\big[a^{+}_{\nu_1}(\tfrac{1}{2}) a_{\nu_2}(-\tfrac{1}{2}) - a^{+}_{\nu_1}(-\tfrac{1}{2}) a_{\nu_2}(\tfrac{1}{2})\big]\Big\} \qquad (\text{I } 3.4)$$

gde je $S^{\alpha}_{f}(\alpha = x, y, z)$ operator spina elektrona koji pripadaju čvoru f. $a^{+}_{\nu\sigma}$, $a_{\nu\sigma}$ $(\sigma = \pm\frac{1}{2})$ Fermi operatori kreacije i anihilacije s-elektrona u stanju sa talasnim vektorom ν i spinom σ .

$E_{\nu\sigma}$ – energija elektrona u stanju (ν,σ);

I – integral d-d razmene

B – integral s-d-razmene a N-broj čvorova u rešetki. Da bi objasnili fizički smisao operatora $\hat{H}_{sd}$ uvedimo sledeće oznake

$$a_{g\sigma} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\nu} a_{\nu g} e^{i(\nu, g)} \qquad I(f) = \frac{1}{N} \sum_{\nu} B(\nu) e^{i(f,\nu)} \qquad (\mathrm{I}\ 3.5)$$

Naravno operatori $a^+_{g\sigma}$ i $a_{g\sigma}$ mogu biti iskorišćeni kao operatori radjanja i uništavanja (kreacije i anihilacije) s-elektrona sa spinom σ u čvoru g.

Koristeći navedene oznake operator $\hat{H}_{sd}$ dobija sledeći oblik.

$$\hat{H}_{sd} = -\frac{1}{2} \sum I(\vec{f}-\vec{g}) \Big\{ S^z_{\vec f} \big[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) - a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) \big] +$$

$$+ S^x_{\vec f} \big[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) + a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) \big] + i S^y_{\vec f} \big[a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) - a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(+\tfrac{1}{2}) \big] \Big\} \qquad (\mathrm{I}\ 3.6)$$

Uvedimo po definiciji sledeće operatore Bogoljubova.

$$\sigma^x_{\vec g} = \frac{1}{2} \big[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) + a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) \big]$$

$$\sigma^y_{\vec g} = \frac{i}{2} \big[a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) - a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) \big]$$

$$\sigma^z_{\vec g} = \frac{1}{2} \big[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) - a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) \big] \qquad (\mathrm{I}\ 3.7)$$

Ovi operatori definisani na prostornim funkcijama okupacionog broja pokazuju koliko se čestica nalazi u odredjenom stanju (na odredjenom energiskom nivou) zadovoljavaju uslove

$$n_{f,-\frac{1}{2}} + n_{f,\frac{1}{2}} = 1 \qquad n_{f\sigma} = a^+_{f\sigma} a_{f\sigma} \qquad (\sigma = \pm \tfrac{1}{2})$$

Znači broj elektrona u čvoru f sa spinom orijentisanim levo plus broj elektrona n_f u čvoru f sa spinom orijentisanim desno mora da bude ravan jedinici. Ovo ne važi za s-elektrone. Ako se ova okolnost zanemari operator H_{sd} dobija oblik integrala razmene koji je prihvaćen u teoriji s-d modela tako da se može interpretirati kao razmena.

$$H_{sd} = -\sum I_{fg} (\sigma_f, \sigma_g) \qquad I_{fg} \equiv I_{(f-g)}$$

II GLAVA

MIGRACIJA VALENTNIH ELEKTRONA

I. 1. Transformacija hamiltonijana interakcije u Blohovoj aproksimaciji.

U ovom delu izvršićemo transformaciju hamiltonijana H_{sd} koji opisuje interakciju valentnih elektrona i elektrona nepopunjenih unutrašnjih ljuski u d sloju koji su odgovorni za magnetizam.

$$H_{sd}=-\frac{1}{2}\sum_{fg} I_{fg}\Big\{S_f^z\big[a_g^+(-\tfrac{1}{2})a_g(-\tfrac{1}{2})-a_g^+(\tfrac{1}{2})a_g(\tfrac{1}{2})\big]+$$
$$+S_f^x\big[a_g^+(-\tfrac{1}{2})a_g(\tfrac{1}{2})+a_g^+(\tfrac{1}{2})a_g(-\tfrac{1}{2})\big]+iS_f^y\big[a_g^+(\tfrac{1}{2})a_g(-\tfrac{1}{2})-a_g^+(-\tfrac{1}{2})a_g(\tfrac{1}{2})\big]\Big\} \qquad (\text{II } 1.0)$$

Ako uvedemo operator $(S-S_f^z)$ koji nam daje meru odstupanja projekcije spina od njene maksimalne vrednosti, a S_f^x i S_f^y izrazimo preko spinskih operatora kreacije i anihilacije H_{sd} će dobiti drugi oblik. $S-S_f^z$ se može meriti.

$$S_f^z = S-(S-S_f^z)$$
$$S_f^x = \frac{S_f^+ + S_f^-}{2} \qquad (\text{II } 1.1)$$
$$S_f^y = \frac{S_f^+ - S_f^-}{2i}$$

Zamenom formule (II 1.1.) u jednačinu (2,1,0) H_{sd} dobija sledeći oblik

$$H_{sd}=-\frac{S}{2}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_g(\tfrac{1}{2})]+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}(S-S^z_{\vec f})[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})]-$$
$$-\frac{1}{4}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}(S^+_{\vec f}+S^-_{\vec f})[a^+_g(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})+a^+_g(\tfrac{1}{2})a_g(-\tfrac{1}{2})]-$$
$$-\frac{1}{4}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}(S^+_{\vec f}-S^-_{\vec f})[a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_g(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})] \quad (\underline{\text{II}}\ 1.2)$$

Kada se izrazi u jednačinu (2,1,2) izmnože i srede izrazi uz $S^+_{\vec f}$ i $S^-_{\vec f}$ dobija se krajnji rezultat za H_{sd} u sledećem obliku.

$$H_{sd}=-\frac{1}{2}S\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})]+$$
$$+\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}(S-S^z_{\vec f})[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})]-$$
$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}[S^+_{\vec f}a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})+S^-_{\vec f}a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})]$$

Odnosno

$$H_{sd}=H^{(2)}_{sd}+H^{(3)}_{sd}+H^{(4)}_{sd} \quad (\underline{\text{II}}\ 1.3)$$

gde je

$$H^{(2)}_{sd}=-\frac{1}{2}S\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})] \quad (\underline{\text{II}}\ 1.4)$$

$$H^{(3)}_{sd}=-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}[S^+_{\vec f}a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})+S^-_{\vec f}a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})] \quad (\underline{\text{II}}\ 1.5)$$

$$H^{(4)}_{sd}=\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g} I_{\vec f\vec g}(S-S^z_{\vec f})[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})] \quad (\underline{\text{II}}\ 1.6)$$

Nas interešuje operator $H_{sd}^{(3)}$ koji je izražen preko Fermi i spinskih operatora kreacije i anihilacije

$$H_{sd}^{(3)} = -\frac{1}{2}\sum_{\vec{f}\vec{g}} I_{\vec{f}\vec{g}}\left[S_{\vec{f}}^{+} a_{\vec{g}}^{+}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec{g}}(-\tfrac{1}{2}) + S_{\vec{f}}^{-} a_{\vec{g}}^{+}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec{g}}(\tfrac{1}{2})\right] \qquad (\underline{\text{II}}\ 1.5)$$

koristeći Blohove aproksimacije operator $H_{sd}^{(3)}$ možemo izraziti preko Boze i Fermi-operatora.

$$\begin{aligned} S - S_{\vec{f}}^{z} &= B_{\vec{f}}^{+} B_{\vec{f}} \\ S_{\vec{f}}^{+} &= \sqrt{2S}\, B_{\vec{f}} \\ S_{\vec{f}}^{-} &= \sqrt{2S}\, B_{\vec{f}}^{+} \end{aligned} \qquad (\underline{\text{II}}\ 1.7)$$

$$H_{sd}^{(3)} = -\sqrt{\frac{S}{2}}\sum_{\vec{f}\vec{g}} I_{\vec{f}\vec{g}}\, a_{\vec{g}}^{+}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec{g}}(-\tfrac{1}{2}) B_{\vec{f}} - \sqrt{\frac{S}{2}}\sum_{\vec{f}\vec{g}} I_{\vec{f}\vec{g}}\, B_{\vec{f}}^{+} a_{\vec{g}}^{+}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec{g}}(\tfrac{1}{2})$$

odnosno $H_{sd}^{(3)} = \left[H_{sd}^{(3)}\right]_{\text{I}} + \left[H_{sd}^{(3)}\right]_{\underline{\text{II}}}$ $\qquad (\underline{\text{II}}\ 1.8)$

gde je

$$\left[H_{sd}^{(3)}\right]_{\text{I}} = -\sqrt{\frac{S}{2}}\sum_{\vec{f}\vec{g}} I_{\vec{f}\vec{g}}\, a_{\vec{g}}^{+}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec{g}}(-\tfrac{1}{2}) B_{\vec{f}} \qquad (\underline{\text{II}}\ 1.9)$$

$$\left[H_{sd}^{(3)}\right]_{\underline{\text{II}}} = -\sqrt{\frac{S}{2}}\sum_{\vec{f}\vec{g}} I_{\vec{f}\vec{g}}\, B_{\vec{f}}^{+} a_{\vec{g}}^{+}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec{g}}(\tfrac{1}{2}) \qquad (\underline{\text{II}}\ 1.10)$$

Izrazimo sledeće veličine preko Furije transformacija

$$\begin{aligned} I_{\vec{f}\vec{g}} &= \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}} J_{\vec{k}}\, e^{i\vec{k}(\vec{f}-\vec{g})} \\ a_{\vec{g}}^{+}(\tfrac{1}{2}) &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_1}^{+}(\tfrac{1}{2})\, e^{-i\vec{k}_1\vec{g}} \\ a_{\vec{g}}(-\tfrac{1}{2}) &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2}(-\tfrac{1}{2})\, e^{i\vec{k}_2\vec{g}} \\ a_{\vec{g}}^{+}(-\tfrac{1}{2}) &= \frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{k}_2} a_{\vec{k}_2}^{+}(-\tfrac{1}{2})\, e^{-i\vec{k}_2\vec{g}} \end{aligned} \qquad (\underline{\text{II}}\ 1.11)$$

$$a_{\vec{g}}(\tfrac{1}{2}) = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_1} a_{\vec{k}_1}(\tfrac{1}{2})\, e^{i\vec{k}_1\vec{g}}$$

$$B_f^{+} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3}^{+}\, e^{-i\vec{k}_3\vec{f}} \qquad (\text{II } 1.11)$$

$$B_f^{-} = \frac{1}{\sqrt{N}} \sum_{\vec{k}_3} B_{\vec{k}_3}\, e^{i\vec{k}_3\vec{f}}$$

Zamenom jednačina (II 1.11) u jednačine (II 1.9 i II 1.10) i koristeći formulu

$$\sum_{\vec{f}} e^{i\vec{f}(\vec{k}-\vec{k}')} = N\,\delta_{\vec{k},\vec{k}'} \qquad (\text{II } 1.12)$$

dobićemo sledeće vrednosti za $[H_{sd}^{(3)}]_{I}$ i $[H_{sd}^{(3)}]_{II}$

$$[H_{sd}^{(3)}]_{I} = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{S}{2}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} J_{\vec{k}}\, a_{\vec{q}}^{+}(\tfrac{1}{2})\, a_{\vec{q}-\vec{k}}(-\tfrac{1}{2})\, B_{\vec{k}} \qquad (\text{II } 1.13)$$

$$[H_{sd}^{(3)}]_{II} = -\frac{1}{\sqrt{N}}\sqrt{\frac{S}{2}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} J_{\vec{k}}\, B_{\vec{k}}^{+}\, a_{\vec{q}-\vec{k}}^{+}(-\tfrac{1}{2})\, a_{\vec{g}}(\tfrac{1}{2}) \qquad (\text{II } 1.14)$$

Hamiltonijan H_{sd} formula (II 1.13) opisuje proces apsorpcije spinskih talasa tj. takav proces gde elektron sa impulsom $\vec{q}-\vec{k}$ apsorbuje spinski talas sa impulsom $\vec{k}$ i dobija novi impuls $\vec{q}$.

Hamiltonijan (II 1.14) opisuje obrnut proces u kome elektron gubi impuls i energiju da bi se za račun toga stvorio jedan spinski talas. Ovaj proces naziva se proces emisije spinskih talasa.

II. 2. VEROVATNOĆA EMISIJE SPINSKIH TALASA

Ako posmatramo sistem koji se nalazi na apsolutnoj nuli onda očigledno postoji samo mogućnost emisije spinskih talasa. Zbog toga ćemo u svim daljnim računima umesto kompletnog hamiltonijana interakcije koristiti samo hamiltonijan $[H^{(1)}_{sd}]_{\overline{II}}$ jer je na apsolutnoj nuli $[H^{(3)}_{sd}]_{\overline{I}}$ ravno nuli. Da bismo izračunali verovatnoću prelaza $W_{\overline{II}}$ poći ćemo od izraza $[H^{(1)}_{sd}]_{\overline{II}}$ i formule za verovatnoću prelaza iz početnog u krajnje stanje.

$$[H^{(1)}_{sd}]_{\overline{II}} = -\sqrt{\frac{S}{2N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} J_{\vec{k}} B^{+}_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{q}-\vec{k},}\left(-\tfrac{1}{2}\right) a_{\vec{q}}\left(\tfrac{1}{2}\right)$$

$$|\text{početno stanje}\rangle = |1^{e}_{\vec{q}}, \tfrac{1}{2}\rangle |0^{e}_{\vec{q}-\vec{k}}, -\tfrac{1}{2}\rangle |0^{m}_{\vec{k}}\rangle \equiv |i\rangle \qquad (\overline{II}\ 2.1)$$

$$|\text{krajne stanje}\rangle = |0^{e}_{\vec{q}}, \tfrac{1}{2}\rangle |1^{e}_{\vec{q}-\vec{k}}, -\tfrac{1}{2}\rangle |1^{m}_{\vec{k}}\rangle \equiv |f\rangle$$

Znači u početnom stanju imamo jedan elektron sa spinom $\frac{1}{2}$ i impulsom $\vec{q}$, nula elektrona sa ~~impulsom~~ спином $-\frac{1}{2}$ i impulsom $\vec{q}-\vec{k}$ i nula magnona sa impulsom $\vec{k}$. U krajnjem stanju imamo nula elektrona sa spinom $\frac{1}{2}$, jedan elektron sa spinom $-\frac{1}{2}$ impulsom $\vec{q}-\vec{k}$ i jedan magnon sa impulsom $\vec{k}$.
Verovatnoća $(W)_{\overline{II}}$ prelaza iz inicijalnog u finalno stanje data je sledećim izrazom

$$W_{\overline{II}} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{if}|^{2} \delta(E_f - E_i) \qquad (\overline{II}\ 2.2)$$

gde je E_f -energija finalnog stanja, E_i - energija inicijalnog stanja a M_{if} - matični element prelaza iz inicijalnog u finalno stanje i dat je izrazom

$$M_{if} = -\sqrt{\frac{S}{2N}} J_{k} \langle f | B^{+}_{\vec{k}} a^{+}_{\vec{q}-\vec{k}}\left(-\tfrac{1}{2}\right) a_{\vec{q}}\left(\tfrac{1}{2}\right) | i\rangle \qquad (\overline{II}\ 2.3)$$

$$M_{if} = -\sqrt{\frac{S}{2N}}\, J_{\vec{k}} \sqrt{n_{\vec{k}}+1}$$

Pošto radimo na apsolutnoj nuli broj magnona $n_{\vec{k}}$ je nula pa je matični element

$$M_{if} = -\sqrt{\frac{S}{2N}}\, J_{\vec{k}} \qquad (\text{II}\ 2.4)$$

$$E_f = \mathcal{E}_e^{(-\frac{1}{2})}(\vec{q}-\vec{k}) + E_M$$

$$E_i = \mathcal{E}_e^{(\frac{1}{2})}(\vec{q})$$

$$E_f - E_i = \mathcal{E}_e^{(\frac{1}{2})}(\vec{q}-\vec{k}) + E_M - \mathcal{E}_e^{(\frac{1}{2})}(\vec{q}) \qquad (\text{II}\ 2.5)$$

Energija elektrona sa spinom $\pm\frac{1}{2}$ ima sledeću vrednost

$$\mathcal{E}_e^{(\pm\frac{1}{2})} = \frac{\hbar^2 |\vec{k}|^2}{2\, m_e} + \mu$$

gde je μ - hemiski potencijal.

$$E_f - E_i = E_M + \frac{\hbar^2}{2m_e}(\vec{q}-\vec{k})^2 - \frac{\hbar^2 q^2}{2m_e}$$

Kada se sredi dobijamo

$$E_f - E_i = E_M + \frac{\hbar^2}{2m_e}(k^2 - 2qk\cos\theta) \qquad (\text{II}\ 2.6)$$

gde je θ ugao izmedju elektrona i magnona (talasnih vektora elektrona $\vec{q}$ i magnona $\vec{k}$).

IZRAČUNAVANJE ENERGIJE MAGNONA E_M

Za prostu kubnu strukturu i u aproksimaciji najbližih suseda zakon disperzije za magnone možemo izračunati na sledeći način

$$E_M = S(A_0 - A_k)\ ;\ A_0 = 6A$$

$$A_k = 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

Za male vrednosti k sledi dalje

$$\cos ka = 1 - \frac{1}{2}k^2a^2$$

Posle niza računanja i sredjivanja dobijamo da je energija magnona

$$E_M = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_M} \qquad (\text{II } 2.7)$$

gde je masa magnona m_M

$$m_M = \frac{\hbar^2}{2SAa^2} \qquad (\text{II } 2.8)$$

Zamenom izraza (II 2.7. u II 2.6.) dobijamo da je

$$E_f - E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2m_M} + \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \frac{\hbar^2 q k}{m_e}\cos\theta$$

kada se dalje sredi

$$E_i - E_f = \frac{\hbar^2}{2\mu}k^2 - \hbar v_e \cos\theta k \qquad (\text{II } 2.9)$$

gde je $\mu = \frac{m_e m_M}{m_e + m_M}$ a $v_e = \frac{\hbar q}{m_e}$

IZRAČUNAVANJE J_k

$$J_k = 2A(\cos k_x a + \cos k_y a + \cos k_z a)$$

za $ka \ll 1$ uzimamo da je približno

$$J_k = 6I \Rightarrow J_k^2 = 36I^2 \qquad (\text{II } 2.10)$$

Zamenom jednačina (II 2.4; II 2.9.) i II 2.10. u formulu II 2.2. dobićemo verovatnoću $W_{\underline{II}}$ u funkciji q i k .

$$W_{\underline{II}}(q,k)=\frac{36I^2\pi S}{\hbar}\,\frac{1}{N}\,\delta\left(\frac{\hbar^2}{2\mu}k^2-\hbar v_e\cos\theta k\right) \qquad (\underline{II}\ 2.11)$$

Uzimajući u obzir osobine δ - funkcije možemo napisati da je

$$\delta\left(\frac{\hbar^2k^2}{2\mu}-\hbar v_e\cos\theta k\right)=-\frac{1}{\hbar v_e\cos\theta}\delta(k)+\frac{1}{\hbar v_e\cos\theta}\delta\left(k-\frac{2\mu v_e\cos\theta}{\hbar}\right)$$

pa je $W_{\underline{II}}(q,k)$ dato izrazom.

$$W_{\underline{II}}(q,k)=\frac{36\pi SI^2}{\hbar^2 v_e\cos\theta}\,\frac{1}{N}\left[\delta\left(k-\frac{2\mu v_e\cos\theta}{\hbar}\right)-\delta(k)\right] \qquad (\underline{II}\ 2.12)$$

Pre svega da naglasimo da je integracija od $\delta(k)$ kad $k\to 0$ je nula.

$W_{\underline{II}}(q)=\sum_k W_{\underline{II}}(q,k)$ i koristeći izraz

$\frac{1}{N}\sum_k=\frac{V}{2\pi}\,\frac{1}{N}\int d^3k$ gde je $V=Na^3$ a

$$d^3k=k^2dk\,d\varphi\,d\theta\sin\theta$$

$$W_{\underline{II}}(q)=\frac{36\pi SI^2}{2\hbar^2v_e}\,\frac{1}{N}\,\frac{Na^3}{(2\pi)^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\frac{\pi}{2}}\frac{d\theta\sin\theta}{\cos\theta}\int_{-k_{max}}^{k_{max}}\delta\left(k-\frac{2\mu v_e\cos\theta}{\hbar}\right)k^2dk$$

$$W_{\underline{II}}(q)=\frac{9Sa^3I^2\mu^2v_e}{\pi\hbar^4} \qquad (\underline{II}\ 2.13)$$

Totalnu verovatnoću $W_{\underline{II}}^{TOT}$ dobićemo ako u jednačinu II 1.28. zamenimo v_e sa $\frac{\hbar q}{m_e}$ izvršimo integraciju po q :

$$W_{\underline{II}}^{TOT} = \frac{9 s a^6 \mu^2 q_{max}^4}{16\pi^3 \hbar^3 m_e} I^2 \qquad (\underline{II}\ 2.14)$$

Jednačina (II 2.14.) predstavlja totalnu verovatnoću prelaza iz inicijalnog u finalno stanje za vrednosti energije elektrona $E^e_{(1/2)} = E^e_{(-1/2)}$

IZRAČUNAVANJE NEKIH VELIČINA ZA DATE VREDNOSTI

$$\begin{array}{ll} A = 1{,}5\cdot 10^3 K_b & K_b = 1{,}38\cdot 10^{-16} erg \\ m_e = 9{,}107\cdot 10^{-28} gr. & \\ a = 2\cdot 10^{-8} cm. & \hbar = 1{,}05\cdot 10^{-27} erg \\ s = \frac{3}{2} & \\ I = 2\cdot 10^3 K_b & E_{FS} = 2\,eV \end{array} \qquad (\underline{II}\ 2.15)$$

a) IZRAČUNAVANJE MASE MAGNONA m_M

$$m_M = \frac{\hbar^2}{2 s a^2 A} = 4{,}4\cdot 10^{-27} gr \qquad (\underline{II}\ 2.16)$$

b) IZRAČUNAVANJE REDUKOVANE MASE

$$\mu = \frac{m_e\, m_M}{m_e + m_M} = m_e \frac{1}{1+\frac{m_e}{m_M}} \qquad (\underline{II}\ 2.17)$$

$$\mu = 7{,}56\cdot 10^{-28}$$

c) IZRAČUNAVANJE VREDNOSTI q_{max}

$$\frac{\hbar^2 q^2_{max}}{2m_e} = E_{FS} \Rightarrow q^2_{max} = \frac{2m_e E_{FS}}{\hbar^2}$$

$$q^2_{max} = \frac{2\cdot 9{,}107\cdot 10^{-28}\cdot 2\cdot 1{,}6\cdot 10^{-12}}{(1{,}05\cdot 10^{-27})^2} = 52{,}87\cdot 10^{14}\,cm^{-2}$$

$$q_{max} = 7{,}3\cdot 10^{7}\,cm^{-1} \qquad (\text{II } 2.18)$$

$$q^3_{max} = 3{,}844\cdot 10^{23}\,cm^{-3}$$

II 3. SREDNJI SLOBODNI PUT

Slobodni put elektrona pri sudaru sa magnonom definisaćemo izrazom

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{1}{v_e \tau} \qquad (\text{II } 3.1)$$

gde je v_e brzina elektrona, τ vreme relaksacije

$$\frac{1}{\tau} = \sum_k \frac{k^2}{q^2} W_{II}(q,k) \qquad (\text{II } 3.2)$$

Koristeći jednačinu (II 1.27.) za $W_{II}(q,k)$ dobijamo

$$\frac{1}{\tau} = \frac{36\pi S I^2}{2\hbar^2 v_e q^2} \frac{1}{N} \frac{N a^3}{8\pi^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi/2} \frac{d\theta \sin\theta}{\cos\theta} \int_{-k_{max}}^{k_{max}} \delta\left(k - \frac{2\mu v_e \cos\theta}{\hbar}\right) k^4 dk$$

Kada se navedeni izraz izračuna i posle q se zameni sa $\frac{m v_e}{\hbar}$ dobićemo krajnji rezultat

$$\frac{1}{\tau} = \frac{18 S I^2 a^3 \mu^4 v_e}{\pi \hbar^4 m_e^2}$$

kada se zameni u jednačinu (II 3.1) dobićemo

$$\frac{1}{\lambda_0} = \frac{18 S I^2 a^3 \mu^4}{\pi \hbar^4 m_e^2}$$

odnosno

$$\lambda_0 = \frac{\pi \hbar^4 m_e^2}{18 S a^3 I^2 \mu^4} = \frac{3{,}14 \cdot (1{,}05 \cdot 10^{-27})^4 (9{,}107 \cdot 10^{-28})^2}{18 \cdot \frac{3}{2} \cdot (2 \cdot 10^{-8})^3 \cdot (2{,}76 \cdot 10^{-13})^2 \cdot (7{,}56 \cdot 10^{-28})^4}$$

$$\lambda_0 = 59 \text{ Å}$$

Srednji slobodni put elektron - magnon definisaćemo izrazom

$$\overline{\frac{1}{\lambda}} = \frac{1}{N}\sum_{q}\frac{1}{\lambda_0} \qquad \text{gde je} \qquad \frac{1}{\lambda_0} = \frac{18SI^2a^3\mu^4}{\pi\hbar^4 m_e^2}$$

$$\overline{\frac{1}{\lambda}} = \frac{18SI^2a^3\mu^4}{\pi\hbar^4 m_e^2}\,\frac{1}{N}\,\frac{Na^3}{8\pi^3}\int_0^{2\pi}d\varphi\int_0^{\pi/2}d\theta\sin\theta\int_0^{q_{max}}q^2\,dq$$

$$\overline{\frac{1}{\lambda}} = \frac{18\,SI^2a^6\mu^4}{4\pi^3\hbar^4 m_e^2}\;\frac{q^3}{3}$$

$$\overline{\frac{1}{\lambda}} = \frac{3}{2}\,\frac{SI^2a^6\mu^4}{\pi^3\hbar^4 m_e^2}\,q_{max}^3 \qquad \text{II } 3.3$$

odnosno

$$\bar{\lambda} = \frac{2\pi^3\hbar^4 m_e^2}{3SI^2a^6\mu^4 q_{max}^3}$$

$$\bar{\lambda} = \frac{2\cdot 3{,}14^3(1{,}05\cdot10^{-27})^4\cdot(9{,}107\cdot10^{-28})^2}{3\cdot\frac{3}{2}\cdot(2{,}76\cdot10^{-13})^2\,(2\cdot10^{-8})^6(7{,}56\cdot10^{-28})^4\cdot3{,}844\cdot10^{23}}$$

$$\bar{\lambda} = 2\,283\,\text{Å}$$

Znači srednji slobodni put pri sudaru elektrona sa magnonom iznosi oko hiljadu konstanti rešetke.

II 4. SREDNJI SLOBODNI PUT SA URAČUNAVANJEM KOREKCIJE ZAKONA DISPERZIJE ZA SLOBODNE ELEKTRONE

U ovom paragrafu odredićemo srednji slobodni put elektrona pri sudaru sa magnonom za vrednosti energije $E^e_{(1/2)} \neq E^e_{(-1/2)}$ ali za isto inicijalno i finalno stanje kao u II 3-em paragrafu. Postupak je analogan 3-em paragrafu.

Podjimo od izraza

$$\left[H^{(3)}_{sd}\right]_{\mathrm{II}} = -\sqrt{\frac{S}{2N}} \sum_{\vec{k}\vec{q}} J_{\vec{k}} B^+_{\vec{k}} a^+_{\vec{q}-\vec{k}}\left(-\tfrac{1}{2}\right) a_{\vec{q}}\left(\tfrac{1}{2}\right)$$

$|$ početno stanje $\rangle = |1^e_{\vec{q}}, \tfrac{1}{2}\rangle |0^e_{\vec{q}-\vec{k}}, -\tfrac{1}{2}\rangle |0^M_{\vec{k}}\rangle \equiv |i\rangle$

$|$ krajnje stanje $\rangle = |0^e_{\vec{q}}, \tfrac{1}{2}\rangle |1^e_{\vec{q}-\vec{k}}, -\tfrac{1}{2}\rangle |1^M_{\vec{k}}\rangle \equiv |f\rangle$

Verovatnoća prelaza iz inicijalnog u finalno stanje glasi:

$$W_{\mathrm{II}} = \frac{2\pi}{\hbar} |M_{if}|^2 \delta(E_f - E_i) \qquad (\mathrm{II}\ 4.1)$$

$$M^2_{if} = \frac{S}{2N} J^2_{\vec{k}} \quad \text{gde je} \quad J^2_{\vec{k}} = 36 I^2 \qquad (\mathrm{II}\ 4.2)$$

$$E_f - E_i = E^M_{\vec{k}} + \mathcal{E}^{(-\frac{1}{2})}_e(\vec{q}-\vec{k}) - E^{(\frac{1}{2})}_e(\vec{q}) \qquad (\mathrm{II}\ 4.3)$$

$$E^{(\frac{1}{2})}_e = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e} - \mu + \frac{S J_0}{2}$$

$$E^{(-\frac{1}{2})}_e = \frac{\hbar^2 k^2}{2 m_e} - \mu - \frac{S J_0}{2} \qquad (\mathrm{II}\ 4.4)$$

Kada se jednačine (II 4.4) zamene u (II 4.3) dobićemo

$$E_f - E_i = \frac{\hbar^2 k^2}{2\mu} - \hbar v_e \cos\theta k - SJ_0$$

pa je verovatnoća

$$W_{\underline{II}} = \frac{36 S \pi I^2}{\hbar N} \delta\left[\frac{\hbar^2}{2\mu}\left(k^2 - \frac{2\mu v_e \cos\theta k}{\hbar} - \frac{2\mu S J_0}{\hbar^2}\right)\right] \qquad (\underline{II}\ 4.5)$$

$$k^2 - \frac{2\mu v_e \cos\theta k}{\hbar} - \frac{2\mu S J_0}{\hbar^2} = 0$$

$$k_{1,2} = \frac{\mu v_e \cos\theta}{\hbar} \pm \sqrt{\left(\frac{\mu v_e \cos\theta}{\hbar}\right)^2 + \frac{2\mu S J_0}{\hbar^2}} \qquad x_{1,2} = -\frac{p}{2} \pm \sqrt{\frac{p^2}{4} - q}$$

Posle niz računanja i sredjivanja δ– funkcije dobijamo sledeći izraz za verovatnoću

$$W_{\underline{II}}(q,k) = \frac{36 \pi S \mu I^2}{\hbar^2 N} \frac{1}{\sqrt{(\mu v_e \cos\theta)^2 + 2\mu S J_0}} \delta\left[k - k_1(\cos\theta)\right] \qquad (\underline{II}\ 4.6)$$

VREME RELAKSACIJE

$$\left(\frac{1}{\tau}\right)_T = \sum_k \frac{k^2}{q^2} W_{\underline{II}}(q,k)$$

$$\left(\frac{1}{\tau}\right) = \frac{36 S \pi \mu I^2}{\hbar^2 N} \sum_k \frac{k^2}{q^2} \frac{1}{\sqrt{(\mu v_e \cos\theta)^2 + 2\mu S J_0}} \delta\left[k - k_1(\cos\theta)\right]$$

$$\left(\frac{1}{\tau}\right) = \frac{36 \pi S \mu I^2}{2 \hbar^2 q^2} \frac{1}{N} \frac{N a^2}{8\pi^3} \int_0^{2\pi} d\varphi \int_0^{\pi} \frac{d\theta \sin\theta}{\sqrt{(\mu v_e \cos\theta)^2 + 2\mu S J_0}} \int_{-k_{max}}^{k_{max}} k^4 \delta(k - k_1)\, dk$$

$$\left(\frac{1}{\tau}\right) = \frac{9 S \mu a^3 I^2}{2\pi \hbar^2 q^2} \int_0^{\pi} \frac{k_1^4(\cos\theta) \sin\theta\, d\theta}{\sqrt{(\mu v_e \cos\theta)^2 + 2\mu S J_0}} \qquad (\underline{II}\ 4.7)$$

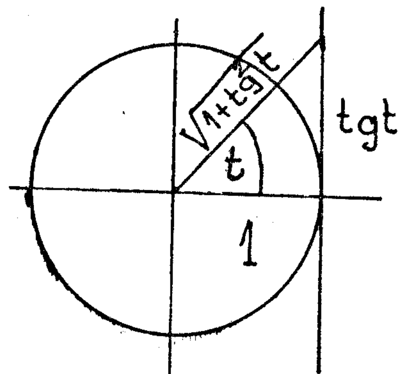
Kada se reši integral dobićemo krajnji rezultat.

$$\left(\frac{1}{\tau}\right) = \frac{9 S a^3 I^2}{2\pi \hbar^6 q^2 v_e} (12\mu S I)^2 \left\{ 8\int \frac{dt}{\cos^6 t} - 8\int \frac{dt}{\cos^3 t} + \int \frac{dt}{\cos t} + 8\int \frac{\sin t\, dt}{\cos^5 t} - 4\int \frac{\sin t\, dt}{\cos^3 t} \right\} \qquad (\underline{II}\ 4.8)$$

Pri rešavanju integrala u poslednjem integralu granice integracije su $\mathrm{arctg}\, v_e \sqrt{\frac{\mu}{12SI}}$ i minus $-\mathrm{arctg}\, v \sqrt{\frac{\mu}{12SI}}$

Izračunaćemo $\sin t$ i $\cos t$ za gornju i donju granicu prema sledećim obrascima i koristeći vrednosti iz jednačina (II 2.15)

$$\cos t = \frac{1}{\sqrt{1+tg^2 t}} = \frac{1}{\sqrt{1+v_e^2 \frac{\mu}{12SI}}}$$



$\cos t = 0{,}4875$ za gornju i donju granicu

$$\sin t = \frac{tg\alpha}{\sqrt{1+tg^2 t}} = v_e \sqrt{\frac{\mu}{12SI}} \cdot \cos t$$

$$v_e = \sqrt{\frac{2E_{FS}}{m_e}} = 8{,}383 \cdot 10^7$$

$\sin t = 0{,}8732$ za gornju granicu

$\sin t = -0{,}8732$ za donju granicu

Kada rešimo integrale u jednačine (II 4.8) zamenimo vrednosti za gornju i donju granicu dobićemo da je izraz u velikoj zagradi jednak 77, 99, pa sledi da je

$$\frac{1}{\tau} = \frac{648 \cdot s^3 a^3 \mu^2 I^4 \, 77{,}99}{\pi \, \hbar^6 q^2 v_F} \qquad (II\ 4.9)$$

Srednji slobodni put λ

$$\frac{1}{\lambda}=\frac{1}{v_F}\cdot\frac{1}{\tau}=\frac{648\cdot s^3 a^3 m^2 I^4}{\pi\ h^6\ q^2\ v_F^2}\ 77{,}99 \text{ odnosno}$$

$$\lambda=\frac{\pi\ h^6 q^2 v_F^2}{648\cdot s^3 a^3 m^2 I^4\cdot 77{,}99} \qquad (\text{II } 4.10)$$

Pošto je $q=\frac{m_e v_F}{h}$ zamenimo u (II 4.10) sledi da je λ

$$\lambda=\frac{\pi\ h^4 m_e^2 v_F^4}{648\ s^3 a^3 M^2 I^4\cdot 77{,}99}$$

$$\lambda=\frac{3{,}14\cdot(1{,}05\cdot 10^{-27})^4\cdot(9{,}107\cdot 10^{-28})^2\cdot(8{,}383\cdot 10^{7})^4}{648\cdot 27\ 10^{-24}\cdot(7{,}56\cdot 10^{-28})^2\cdot 77{,}99\cdot(2{,}76\cdot 10^{-13})^4}$$

$$\lambda=3{,}458\cdot 10^{-8}\,\text{cm}$$

$$\boxed{\lambda=3{,}458\ \text{Å}} \quad \text{za}\quad E^e_{(-1/2)}\neq E^e_{(1/2)}$$

Kao što vidimo srednji slobodni put za elektron sa impulsom bliskom graničnom impulsu fermisfere postaje oko 15 puta manji nego u slučaju kad ove korekcije nisu uračunate.

III GLAVA

UTICAJ VALENTNIH ELEKTRONA NA TERMODINAMIKU HAJZENBERGOVOG FEROMAGNETIKA

III 1. Opšte o funkciji Grina

Analizu fenomena u feromagneticima vršićemo metodom dvovremenskih temperaturskih funkcija Grina, pa je potrebno navesti osnovne elemente teorije ovakvih funkcija. Ako imamo dva operatora $A(t)$ i $B(t')$ gde je t vreme, onda dvovremenska temperaturska funkcija Grina definiše se na sledeći način

$$\langle\langle A(t) | B(t')\rangle\rangle = \theta(t-t')\langle[A(t), B(t')]\rangle \qquad \text{(III 1.1)}$$

gde je $\theta(t-t')$ Hevisajdova funkcija definisana na sledeći način

$$\theta(t-t') = \begin{cases} 1 \text{ za } t > t' \\ 0 \text{ za } t < t' \end{cases} \qquad \text{(III 1.2)}$$

Simbol $\langle \cdots\cdots \rangle$ predstavlja statističku srednju vrednost po Gipsovom ansamblu

$$\langle \alpha \rangle = \frac{Sp\,\alpha e^{-\beta H}}{Sp\,e^{-\beta H}} \text{ gde je } \beta = \frac{1}{K_b T} \qquad \text{(III 1.3)}$$

H-hamiltonijan sistema. Ako izraz (III 3.1) diferenciramo po t dobijamo

$$\frac{d}{dt}\langle\langle A(t) | B(t')\rangle\rangle = \delta(t-t')\langle[A(t), B(t')]\rangle + \theta(t-t')\langle[\frac{dA(t)}{dt}, B(t')]\rangle \qquad \text{(III 1.4)}$$

Na osnovu definicije(III 1.1) očigledno je da je izvod Hevisajdove funkcije jednak δ funkciji. Pošto je u skladu sa Hajzenbergovom jednačinom kretanja

$$i\frac{dA(t)}{dt} = [A, H]_t \qquad \text{(III 1.5)}$$

jednačina (III 1.4) svodi se na oblik

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t) | B(t')\rangle\rangle = i\,\delta(t-t')\langle[A(t), B(t')]\rangle +$$
$$+\theta(t-t')\langle[[A, H]_t, B(t')]\rangle$$

Po definiciji (III 1.1) izraz $\theta(t-t')\langle[A,H]_t, B(t')\rangle$ je neka nova funkcija Grina $\langle\langle [A,H]_t \mid B(t')\rangle\rangle$ i sledi dalje

$$i\frac{d}{dt}\langle\langle A(t)\mid B(t')\rangle\rangle = i\delta(t-t')\langle[A(t),B(t')]\rangle + \langle\langle [A,H]_t, B(t')\rangle\rangle \qquad (\text{III } 1.6)$$

Vidimo da funkciju Grina $\langle\langle A\mid B\rangle\rangle$ izražavamo preko nove funkcije Grina $\langle\langle [A,H]\mid B\rangle\rangle$ itd. Na ovaj način za funkciju Grina $\langle\langle A\mid B\rangle\rangle$ dobijamo beskonačan lanac jednačina. Da bi se lanac završio, moramo na osnovu neke aproksimacije više funkcije Grina napr. $\langle\langle [A,H]\mid B\rangle\rangle$, izraziti preko nižih funkcija Grina $\langle\langle A\mid B\rangle\rangle$ tako da se lanac zatvara i možemo ga rešiti po traženoj funkciji $\langle\langle A\mid B\rangle\rangle$.

Jednačinu (III 1.6) možemo napisati u energiskoj reprezentaciji tj. u Furije likovima Grinovih funkcija u transformaciji vreme - energija. Ako uzmemo da je

$$\langle\langle A(t)\mid B(t')\rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, \langle\langle A\mid B\rangle\rangle_E\, e^{iE(t-t')}$$

$$\langle\langle [A,H]_t\mid B(t')\rangle\rangle = \int_{-\infty}^{\infty} dE\, \langle\langle [A,H]\mid B\rangle\rangle_E\, e^{-iE(t-t')}$$

$$\delta(t-t') = \frac{1}{2\pi}\int_{-\infty}^{\infty} dE\, e^{-iE(t-t')}$$

i zamenimo u (III 1.6) dobijamo, posle oslobadjanja od integrala po energiji

$$E\langle\langle A\mid B\rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi}\langle[A,B]\rangle + \langle\langle [A,H\rangle\mid B\rangle\rangle \qquad (\text{III } 1.7)$$

Jednačina (III 1.7) je osnovna jednačina za traženje funkcije Grina. U homogenoj i izotropnoj sredini operatori A i B zavise od koordinata, pa će i njihov proizvod zavisiti od koordinata. Znači da u jednačini)III 1.7) možemo izvršiti Furije transformaciju prostor impuls. Ako uzmemo da je

$$\langle\langle A(\vec r)\mid B(\vec r)\rangle\rangle_E = \int d^3\vec k\, \langle\langle A(\vec k)\mid B(\vec k)\rangle\rangle_E\, e^{i\vec k(\vec r-\vec r')}$$

$$\langle\langle [A,H]_{\vec r}\mid B(\vec r)\rangle\rangle_E = \int d^3\vec k\, \langle\langle [A,H]_{\vec k}\mid B(\vec k)\rangle\rangle_E\, e^{i\vec k(\vec r-\vec r')}$$

$$\langle [A,B] \rangle_{\varrho-\varrho'} = d^3\vec{k}\ \langle [A,B] \rangle_{\vec{k}}\, e^{-i\vec{k}(\vec{r}-\vec{r}')}$$

Kada navedene izraze uvrstimo u jednačinu (III 1.7.) dobijamo, posle oslobodjenja od integrala po $\vec{k}$:

$$E \langle\langle A(\vec{k}) | B(\vec{k}) \rangle\rangle_E = \frac{i}{2\pi} \langle [A,B] \rangle_k + \langle\langle [A,H]_{\vec{k}} | B(\vec{k}) \rangle\rangle_E \qquad (\text{III } 1.8)$$

Funkcija Grina $\langle\langle A(\vec{k}) | B(\vec{k}) \rangle\rangle_E$ definiše energiju elementarnih ekscitacija i njihovo vreme života. Energija elementarnih ekscitacijaje apscisa pola Grinove funkcije u kompleksnoj E ravni, dok je vreme života ekscitacije recipročnoj vrednosti ordinate pola Grinove funkcije. Važan pojam u teoriji Grinove funkcije je spektralna intezivnost Grinove funkcije definisana kao

$$J(E,\vec{k}) = \frac{1}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}\left[G(E-i\varepsilon)-G(E-i\varepsilon)\right] = \frac{\langle [A,B]\,\vec{k} \rangle}{e^{\frac{E}{\theta}}-1}\,\delta(E-E\vec{k}) \qquad (\text{III } 1.9)$$

gde je $E\vec{k}$ realni deo pola Grinove funkcije. Pomoću spektralne intezivnosti može se naći srednja vrednost operatora BA na sledeći način.

$$\langle B(\vec{k})A(\vec{k}) \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} J(E,\vec{k})\,dE = \frac{\langle [A,B]_{\vec{k}} \rangle}{e^{\frac{E\vec{k}}{\theta}}-1} \qquad (\text{III } 1.\ 10.)$$

Na kraju možemo zaključiti da nam poznavanje Grinove funkcije omogućava da nadjemo energiju elementarnih ekscitacija u sistemu, vreme života elementarnih ekscitacija i na osnovu (III 1. 10) da nadjemo populacioni broj elementarnih ekscitacija kao funkciju temperature. Znači nemoramo znati statistiku elementarnih ekscitacija koje istražujemo jer nam nalaženje funkcije Grina automatski rešava taj problem.

III 2. ZAKON DISPERZIJE ZA MAGNONE

Interakcija lokalizovanih spinova sa valentnim elektronima menja energiju magnona. Ako nema S-d interakcije što drugim rečima znači da u obzir uzimamo samo hamiltonijan H_S (spinski) onda zakon disperzije za magnone u aproksimaciji haotičnih faza (o kojoj će kasnije biti reči) glasi:

$$E_M(\vec{k}) = S(A_0 - A_{\vec{k}})\sigma \qquad (III\ 2.1.)$$

gde su A_0 i $A_{\vec{k}}$ Furije likovi integrala izmene za lokalizovane spinove, σ - magnetizacija. U slučaju $S = \frac{1}{2}$ koji ćemo mi dalje razmatrati gornja formula glasi

$$E_M(\vec{k}) = \frac{1}{2}(A_0 - A_{\vec{k}})\sigma \qquad (III\ 2.2)$$

Naš zadatak biće da ispitamo kako u aproksimaciji haotičnih faza S-d interakcija menja zakon disperzije za magnone (III 2.2) Prethodno ćemo nešto preurediti hamiltonijan sistema. Spinski hamiltonijan ima oblik $H_S = -\frac{1}{2}\sum A_{\vec{f}-\vec{g}}\ \hat{\vec{S}}_{\vec{f}}\hat{\vec{S}}_{\vec{g}}$ (III 2,3)

$A_{\vec{f}-\vec{g}}$ su integrali izmene za lokalizovane spinove

$$\hat{\vec{S}}_{\vec{f}} = S^x_{\vec{f}}\vec{i} + S^y_{\vec{f}}\vec{j} + S^z_{\vec{f}}\vec{k}$$
$$\hat{\vec{S}}_{\vec{g}} = S^x_{\vec{g}}\vec{i} + S^y_{\vec{g}}\vec{j} + S^z_{\vec{g}}\vec{k}$$

iz ove dve jednačine dobijamo da je

$$\hat{\vec{S}}_{\vec{f}}\hat{\vec{S}}_{\vec{g}} = S^x_{\vec{f}}S^x_{\vec{g}} + S^y_{\vec{f}}S^y_{\vec{g}} + S^z_{\vec{f}}S^z_{\vec{g}} \qquad (III\ 2.4)$$
$$f \neq g$$

Za osnovno stanje $S = S^z_{\vec{n}}$, a za pobudjeno stanje $S^z_{\vec{n}} \neq S$ a $S - S^z_{\vec{f}}$ nam daje meru odstupanja projekcije spina od njegove maksimalne vrednosti. Pošto je $S^+_{\vec{n}} = S^x_{\vec{n}} + iS^y_{\vec{n}}$ a $S^-_{\vec{n}} = S^x_{\vec{n}} - iS^y_{\vec{n}}$

iz kojih sledi da je $S^x_{\vec{f}} = \dfrac{S^+_{\vec{f}} + S^-_{\vec{f}}}{2}$, $S^y_{\vec{f}} = \dfrac{S^+_{\vec{f}} - S^-_{\vec{f}}}{2i}$

a $S^z_{\vec{f}} = S - (S - S^z_{\vec{f}})$ $\qquad f = n$

dobijamo da je

$$\hat{S}_{\vec f}\hat{S}_{\vec g}=\frac{S^-_{\vec f}S^+_{\vec g}+S^+_{\vec f}S^-_{\vec g}}{2}+S^2-S(S-S^z_{\vec f})-S(S-S^z_{\vec g})+(S-S^z_{\vec f})(S-S^z_{\vec g}) \quad \text{(III 2.5)}$$

Zamenom formule (III 2.5) u (III 2.3) imajući u vidu da je

$$\vec f-\vec g=\vec\ell,\ A_{\vec f-\vec g}=A_{\vec g-\vec f},\ \sum 1=N,\ \sum_{\vec\ell}A_{\vec\ell}=A=\sum_{\vec g}A_{og},\ f\rightleftarrows g\ \text{i}\ S^+_{\vec f}S^-_{\vec g}=S^-_{\vec f}S^+_{\vec g}$$

dobijamo za spinski hamiltonijan sledeću vrednost.

$$H_S=-\frac{1}{2}ANS^2+SA_o\sum_{\vec f}(S-S^z_{\vec f})-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}A_{\vec f\vec g}S^-_{\vec f}S^+_{\vec g}-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}A_{\vec f\vec g}(S-S^z_{\vec f})(S-S^z_{\vec g}) \quad \text{(III 2.6)}$$

odnosno $H_S=H_0+H_2+H_4$ gde je $H_0=-\frac{1}{2}NA_oS^2$

$$H_2=SA_o\sum_{\vec f}(S-S^z_{\vec f})-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}A_{\vec f\vec g}S^-_{\vec f}S^+_{\vec g}$$

$$H_4=-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}A_{\vec f\vec g}(S-S^z_{\vec f})(S-S^z_{\vec g})$$

Dalje ćemo razmatrati slučaj spina $S=\frac{1}{2}$. Tada je $S^-_{\vec f}=P^+$, $S^+_{\vec f}=P$ i $S-S^z_{\vec f}=P^+_{\vec f}P_{\vec f}$ gde su P^+ i P Pauli-operatori.

Posle rešenja jednačina (III 2.6) postaje

$$H_S=-\frac{1}{8}NA_o+\frac{1}{2}A_o\sum_{\vec f}P^+_{\vec f}P_{\vec f}-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}A_{\vec f\vec g}P^+_{\vec f}P_{\vec f}-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}A_{\vec f\vec g}P^+_{\vec f}P_{\vec f}P^+_{\vec f}P_{\vec f} \quad \text{(III 2.7)}$$

Hamiltonijan valentnih elektrona ima oblik

$$H_V=\sum_{\vec k\vec\sigma}E_{\vec k\vec\sigma}a^+_{\vec k\vec\sigma}a_{\vec k\vec\sigma}\quad \text{gde je}\quad E_{\vec k\vec\sigma}=E_k=\frac{\hbar^2k^2}{2m_e}-\mu$$

H_V je napisan u impulsnom prostoru.

Hamiltonijan interakcije preuredićemo na sledeći način:

$$H_{sd}=-\frac{1}{2}\sum_{\vec f\vec g}I_{\vec f\vec g}\Big\{S^z_{\vec f}[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})]+$$

$$+S^x_{\vec f}[a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})+a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})]+$$

$$+iS^y_{\vec f}[a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})-a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2})a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})]\Big\}$$

Koristeći sledeće vrednosti za

$$S^x_{\vec f} = \frac{S^+_{\vec f} + S^-_{\vec f}}{2} \quad ; \quad S^y_{\vec f} = \frac{S^+_{\vec f} - S^-_{\vec f}}{2i} \quad i \quad S^z_{\vec f} = S - (S - S^z_{\vec f} \qquad \mathcal{J}_0 = \sum_{\ell} I_{\vec \ell}$$

dobijamo

$$H_{sd} = -\frac{1}{2} S \mathcal{J}_0 \sum_{\vec g} [a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) - a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})] +$$
$$\vec f \rightarrow \vec g$$
$$+ \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} I_{\vec f \vec g} (S - S^z_{\vec f}) [a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) - a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(\tfrac{1}{2})] -$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} I_{\vec f \vec g} [S^+_{\vec f} a^+_{\vec g}(\tfrac{1}{2}) a_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) + S^-_{\vec f} a^+_{\vec g}(-\tfrac{1}{2}) a_{g}(\tfrac{1}{2})] \qquad (\text{III } 2.9)$$

uzmimo samo za prvi član jednačine (III 2.9) da $\vec f \rightarrow \vec g$
dalje $S = \frac{1}{2}$, $-\frac{1}{2} \equiv 2$ $\quad \frac{1}{2} \equiv 1$

$$S - S^z_{\vec f} = \frac{1}{2} - S^z_{\vec f} = P^+_{\vec f} P_{\vec f} \;;\; S^+_{\vec f} = P_{\vec f} \;;\; S^-_{\vec f} = P^+_{\vec f} \qquad (\text{III } 2.10)$$

Kada iskoristimo navedene oznake i obrasce (III 2.10) zamenimo u jednačinu (III 2.9) dobijamo H_{sd} hamiltonijan u sledećem obliku

$$H_{sd} = \frac{1}{4} \mathcal{J}_0 \sum_{\vec f} [a^+_{1\vec f} a_{1\vec f} - a^+_{2\vec f} a_{2\vec f}] -$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} I_{\vec f \vec g} P^+_{\vec f} P_{\vec f} [a^+_{1\vec g} a_{1\vec g} - a^+_{2\vec g} a_{2\vec g}] - \qquad (\text{III } 2.11)$$
$$- \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} I_{\vec f \vec g} [P^+_{\vec f} a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} + P_{\vec f} a^+_{1\vec g} a_{2\vec g}]$$

Koristeći formule (III 3.15; III 3.16 i III 3.20) odredićemo efektivni hamiltonijan $\mathcal{H}_{ef}$.

$$\mathcal{H}_{ef} = h_0 + h_e + h_s + h_{se} \qquad (\text{III } 2.12)$$

gde je $h_0 = \frac{1}{8} AN$ $\qquad$ (III 2.13)

$$h_e = \sum_{\vec k \vec G} \mathcal{E}_{\vec k \vec G} a^+_{\vec k \vec G} a_{\vec k \vec G} \;;\; \mathcal{E}_{\vec k}(\tfrac{1}{2}) = E_{\vec k} + \frac{1}{4} \mathcal{J}_0 \;;\; \mathcal{E}_{\vec k}(-\tfrac{1}{2}) = E_{\vec k} - \frac{1}{4} \mathcal{J}_0 \qquad (\text{III } 2.14)$$

$$h_e = \frac{1}{2} A_0 \sum_{\vec f} P^+_{\vec f} P_{\vec f} - \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} A_{\vec f \vec g} P^+_{\vec f} P_{\vec g} - \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} A_{\vec f \vec g} P^+_{\vec f} P_{\vec f} P^+_{\vec g} P_{\vec g} \qquad (\text{III } 2.15)$$

$$h_{se} = \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} I_{\vec f \vec g} [P^+_{\vec f} a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} + P_{\vec f} a^+_{1\vec g} a_{2g}] - \frac{1}{2} \sum_{\vec f \vec g} I_{\vec f \vec g} P^+_{\vec f} P_{\vec f} [$$
$$[a^+_{1\vec g} a_{1\vec g} - a^+_{2\vec g} a_{2\vec g}] \qquad (\text{III } 2.16)$$

Da bi našli zakon disperzije polazimo od dvovremenske paulionske funkcije Grina koja je data izrazom .

$$E\langle\langle P_{\vec n} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}\left(1-2\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n}\rangle\right)\delta_{\vec n\vec m} + \langle\langle [P_{\vec n}, \mathcal{H}_{ef}] | P^+_{\vec m}\rangle\rangle \quad (\mathrm{III}\ 2.17)$$

Kao što se vidi u jednačinu (III 2.17) u drugom članu treba naći komutator Pauli-operatora i efektivnog hamiltonijana. Da bi smo našli njihov komutator moramo imati u vidukomutacione relacije za Pauli-operatore.

$$[P_{\vec f}, P^+_{\vec g}] = (1-2P^+_{\vec f} P_{\vec f})\delta_{\vec f\vec g}$$

$$P^2_{\vec f} = P^{+2}_{\vec f} = 0 \qquad P^+_{\vec f} P_{\vec f} = 1 \text{ ili } 0 \qquad (\mathrm{III}\ 2.18)$$

$$[P_{\vec f}, P_{\vec g}] = [P^+_{\vec f}, P_{\vec g}] = 0$$

Kada se odredi komutator $[P_{\vec n}, \mathcal{H}_{ef}$ i zameni u jednačinu (III 2.17) dobijamo sledeći oblik paulionske funkcije Grina.

$$E\langle\langle P_{\vec n} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \frac{i}{2\pi}(1-2\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n})\delta_{\vec n\vec m} + \frac{1}{2}A_0\langle\langle P_{\vec n} | P_{\vec m}\rangle\rangle -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec g} A_{\vec n\vec g}[\langle\langle P_{\vec g} | P_{\vec m}\rangle\rangle + \sum_{\vec g} A_{\vec n\vec g}\langle\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n} P_{\vec g} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle -$$

$$-\sum_{\vec g} A_{\vec n\vec g}\langle\langle P^+_{\vec g} P_{\vec g} P_{\vec n} P^+_{\vec m}\rangle\rangle - \frac{1}{2}\sum_{\vec g} I_{\vec n\vec g}\langle\langle a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle +$$

$$+\sum_{\vec g} I_{\vec n\vec g}\langle\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n} a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle -$$

$$-\frac{1}{2}\sum_{\vec g} I_{\vec n\vec g}[\langle\langle P_{\vec n} a^+_{1\vec g} a_{1\vec g} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle - \langle\langle P_{\vec n} a^+_{2\vec g} a_{2\vec g} | P^+_{\vec m}\rangle\rangle] \quad (\mathrm{III}\ 2.19)$$

Dalje ćemo koristiti aproksimaciju haotičnih faza koja se sastoji u sledećem dekuplovanju viših funkcija Grina, pa imamo

$$\langle\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n} P_{\vec g} \mid P^+_{\vec m} \rangle\rangle \cong \langle P^+_{\vec n} P_{\vec n}\rangle \langle\langle P_{\vec g} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle P_{\vec g} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle$$

$$\langle\langle P^+_{\vec g} P_{\vec g} P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m} \rangle\rangle \cong \langle P^+_{\vec g} P_{\vec g}\rangle \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle$$

$$\langle\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n}\, a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} \mid P^+_{\vec m} \rangle\rangle \cong \langle P^+_{\vec n} P_{\vec n}\rangle \langle\langle a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \frac{1-\sigma}{2} \langle\langle a_{2\vec g} a_{1\vec g} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle$$

$$\langle\langle P_{\vec n}\, a^+_{1\vec g} a_{1\vec g} \mid P^+_{\vec m} \rangle\rangle \cong \langle a^+_{1\vec g} a_{1\vec g}\rangle \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \bar n_1 \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle \qquad (\text{III } 2\,20)$$

$$\langle\langle P_{\vec n}\, a^+_{2\vec g} a_{2\vec g} \mid P^+_{\vec m} \rangle\rangle \cong \langle a^+_{2\vec g} a_{2\vec g}\rangle \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \bar n_2 \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle$$

gde je $\bar n_1 = \langle a^+_{1\vec g} a_{1\vec g}\rangle$ a $\bar n_2 = \langle a^+_{2\vec g} a_{2\vec g}\rangle$

$\langle P^+_{\vec n} P_{\vec n}\rangle$ isto je za sve n, jer su svi atomi rešetke isti.
Tačnije za svako g je $\langle a^+_{i\vec g} a_{i\vec g}\rangle$ isto, što znači izraz $\langle a^+_{i\vec g} a_{i\vec g}\rangle$ možemo izbaciti ispred sume po g.
Pošto je po definiciji magnetizacija data kao $\sigma = \frac{\langle S_z\rangle}{S}$
za $S = \frac{1}{2}$; $\sigma = 2\langle S_z\rangle = 2(1-\langle P^+P\rangle)$
$\langle P^+P\rangle = \frac{1-\sigma}{2}$
Imajući u vidu da je $A_0 = \sum_{g} A_{\vec n\vec g}$ i $J_0 = \sum_{g} I_{\vec n\vec g}$ dobijamo

$$\left\{ E - \frac{\sigma A_0}{2} - \frac{1}{2} J_0 (\bar n_2 - \bar n_1)\right\} \langle\langle P_{\vec n} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle = \frac{i\sigma}{2\pi}\delta_{\vec n\vec m} -$$

$$- \frac{\sigma}{2}\sum_{g} A_{\vec n\vec g} \langle\langle P_{\vec g} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle - \frac{\sigma}{2}\sum_{g} I_{\vec n\vec g} \langle\langle a^+_{2\vec g} a_{1\vec g} \mid P^+_{\vec m}\rangle\rangle \qquad (\text{III } 2.21)$$

Posle Furije transformacije jednačine (III 2.21) konačno dobijamo da je

$$[E-\frac{1}{2}\sigma(A_o-A_k)-\frac{1}{2}J_o(n_2-n_1)]\langle\langle P_{\vec{k}}|P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle=$$

$$=\frac{i\sigma}{2\pi}-\frac{\sigma}{2}\frac{1}{\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}}J_k\langle\langle a^+_{2\vec{q}}a_{1,\vec{k}+\vec{q}}P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle \qquad (\text{III } 2.22)$$

gde je $\sum_{\vec{g}}I_{\vec{n}\vec{g}}e^{ik(g-n)}=J_k$ a $A_k=\sum_{\vec{g}}A_{\vec{n}\vec{g}}e^{ik(\vec{g}-\vec{n})}$

U jednačinu (III 2.22) na desnoj strani figuriše još jedna funkcija $G_r$ina koju treba da odredimo da bismo dobili zakon disperzije za magnone. Jednačina za ovu funkciju Grina glasi

$$E\langle\langle a^+_{2\vec{q}}a_{1,\vec{k}+\vec{q}}|P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle=\frac{1}{2\pi}\langle[a^+_{2\vec{q}}a_{1,\vec{k}+\vec{q}},P^+_{\vec{k}}]\rangle\delta_{\vec{k}\vec{q}}+$$

$$+\langle\langle[a^+_{2\vec{q}}a_{1,\vec{k}+\vec{q}},\mathcal{H}_{ef}|P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle$$

Pošto Fermi-operatori a kumutiraju sa Pauli-operatorima komutator $[a^+_{2\vec{q}}a_{1,\vec{k}+\vec{q}},P^+_{\vec{k}}=0$ pa je

$$E\langle\langle a^+_{2\vec{q}}a_{1\vec{k}+\vec{q}}|P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle=\langle\langle[a^+_{2\vec{q}}a_{1,\vec{k}+\vec{q}},\mathcal{H}_{ef}]|P^+_{\vec{k}}\rangle\rangle \quad (\text{III } 2.23)$$

Posle Furije-transformacija operatora h se efektivni hamiltonijan ima oblik

$$\mathcal{H}_{ef}=\sum_{\vec{q}_1}\varepsilon_{1\vec{q}_1}a^+_{1\vec{q}}a_{1\vec{q}_1}+\sum_{\vec{q}_1}\varepsilon_{2\vec{q}_1}a^+_{2\vec{q}_1}-$$

$$-\frac{1}{2\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2\vec{q}_3}J_{\vec{q}_2-\vec{q}_1}P^+_{\vec{q}_3+\vec{q}_2-\vec{q}_1}P_{\vec{q}_3}(a^+_{1\vec{q}_1}a_{1\vec{q}_2}-a^+_{2\vec{q}_1}a_{2\vec{q}_2})- \quad (\text{III } 2.24)$$

$$-\frac{1}{2\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}J_{\vec{q}_2-\vec{q}_1}P^+_{\vec{q}_2-\vec{q}_1}a^+_{2\vec{q}_1}a_{1\vec{q}_2}-\frac{1}{2\sqrt{N}}\sum_{\vec{q}_1\vec{q}_2}J_{\vec{q}_2-\vec{q}_1}P_{\vec{q}_1-\vec{q}_2}a^+_{1\vec{q}_1}a_{2\vec{q}_2}$$

Indeks 1 označava spin $\frac{1}{2}$ a indeks 2 spin $-\frac{1}{2}$. Da bismo našli $\langle\langle a^+_{2\vec{q}} a_{1,\vec{k}+\vec{q}} | P^+_{\vec{k}} \rangle\rangle$ treba izvršiti sledeće operacije. Pri tome treba imati u vidu komutacione relacije Fermi-operatora

$$a_\alpha a^+_\beta + a^+_\beta a_\alpha = \delta_{\alpha\beta}$$
$$a^+_\alpha a^+_\beta = -a^+_\beta a^+_\alpha \qquad (\text{III } 2.25)$$
$$a_\alpha a_\beta = -a_\beta a_\alpha$$

Lako se vidi da je

$$[a^+_{2\vec{q}} a_{1,\vec{k}+\vec{q}}, h_o] = 0; [a_{2\vec{q}} a_{1,\vec{k}+\vec{q}}, h_s] = 0$$

Treba izvršiti furije transformaciju h_{se} i naći komutator $[a^+_{2\vec{q}} a_{1\vec{k}+\vec{q}}, \mathcal{H}_{ef}$ zameniti komutator u jednačinu (III 3.23) i posle dekuplovanja viših funkcija Grina imamo da je

$$\langle\langle a^+_{2\vec{q}} a_{1\vec{k}+\vec{q}} | P^+_{\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{1}{2\sqrt{N}} \frac{J_K(\langle a^+_{1,\vec{k}+\vec{q}} a_{1,\vec{k}+\vec{q}} \rangle - \langle a^+_{2\vec{q}} a_{2\vec{q}} \rangle)}{E - E_{1,\vec{k}+\vec{q}} + E_{2\vec{q}} - \frac{1}{2}\sigma J_o} \langle\langle P_{\vec{k}} | P^+_{\vec{k}} \rangle\rangle$$

$$(\text{III } 2.26)$$

Zamenom jednačine (III 2.26) u (III 2.22) i posle sredjivanja dobijemo konačnu jednačinu za funkciju Grina

$$\left\{E - \frac{1}{2}\sigma(A_o - A_k) - \frac{1}{2}J_o(\bar{n}_2 - \bar{n}_1) + \frac{\sigma}{4N}\sum_{\vec{q}} \frac{J_k^2[\langle a^+_{1\vec{k}+\vec{q}} a_{1\vec{k}+\vec{q}} \rangle - \langle a^+_{2\vec{q}} a_{2\vec{q}} \rangle]}{E - \frac{\sigma}{2}J_o - E_{1\vec{k}+\vec{q}} + E_{2\vec{q}}}\right\} \langle\langle P_{\vec{k}} | P^+_{\vec{k}} \rangle\rangle = \frac{1\sigma}{2\pi} \qquad (\text{III } 2.27)$$

Ovde se vidi da je pol funkcije dat kao:

$$E = \frac{1}{2}\sigma(A_o - A_K) + \frac{1}{2}J_o(\bar{n}_2 - \bar{n}_1) - \frac{\sigma}{4N}\sum_{\vec{q}} \frac{J_K^2(\langle a^+_{1,\vec{k}+\vec{q}} a_{1,\vec{k}+\vec{q}} \rangle - \langle a^+_{2\vec{q}} a_{2\vec{q}} \rangle}{E - \frac{\sigma}{2}J_o - E_{1,\vec{k}+\vec{q}} + E_{2\vec{q}}}$$

Ako zanemarimo proizvod $\sigma(\langle a^{+}_{1,\vec{k}+\vec{q}}\, a_{1\vec{k}+\vec{q}}\rangle - \langle a^{+}_{2\vec{q}} - a_{2\vec{q}}\rangle)$ koji je u okolini tačke prelaza jako malb, jer i $\sigma \to 0$ i $\underbrace{(\langle a^{+}_{1,\vec{k}+\vec{q}}\, a_{1,\vec{k}+\vec{q}}\rangle - \langle a^{+}_{2\vec{q}}\, a_{2\vec{q}}\rangle)}_{\searrow 0}$ imamo približno zakon disperzije

$$E^{(1)}_{k} \cong \frac{1}{2}\sigma(A_0 - A_k) + \frac{1}{2}J_0(\bar{n}_2 - \bar{n}_1) \qquad (\text{III } 2.28)$$

Dalji račun izvešćemo sa ovim zakonom disperzije.

III 3. UTICAJ S-d-INTERAKCIJE NA TAČKU PRELAZA U FEROMAGNETIKU

Kao što je poznato u čistom feromagnetiku na nekoj temperaturi magnetizacija postaje ravna nuli i feromagnetik postaje paramagnetan. Ova tačka T_c naziva se temperatura prelaza ili Kirijeva temperatura. Ako se feromagnetik nalazi u spoljašnjem magnetnom polju onda na temperaturi Kiri magnetizacija ne postaje ravna nuli već u zavisnosti od jačine magnetnog polja ima ili minimum ili asimptotski teži nuli kad $T \to \infty$. U našem slučaju lokalizovani spinovi interaguju sa valentnim elektronima i naš zadatak je da ispitamo kako ova interakcija utiče na magnetizaciju na visokim temperaturama. Uzmimo da je

$$I(E,k) = \frac{\sigma}{e^{\frac{E}{\Theta}} - 1} \delta(E - E_k^{(1)}) \qquad (\text{III } 3.1)$$

$$\langle P_k^+ P_k \rangle = \int_{-\infty}^{\infty} I(E,k)\, dE = \frac{\sigma}{e^{\frac{E_k^{(1)}}{\Theta}} - 1} \qquad (\text{III } 3.2)$$

$$\langle P_n^+ P_n \rangle = \frac{1}{N} \sum_{\vec{k}} \langle P_{\vec{k}}^+ P_{\vec{k}} \rangle = \frac{\sigma}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k^{(1)}}{\Theta}} - 1} \qquad (\text{III } 3.3)$$

u magnetizaciji σ

$$\sigma = 1 - 2 \langle P_n^+ P_n \rangle \qquad (\text{III } 3.4)$$

zamenom jednačine (III 3.3 u III 3.4) i imajući u vidu da je

$$\alpha = \frac{1}{N} \sum_k \frac{1}{e^{\frac{E_k^{(1)}}{\Theta}} - 1}$$ dobijamo

$$\sigma = \frac{1}{1 + 2\alpha}$$ odnosno

$$\sigma = \frac{1}{1+\frac{2}{N}\sum_{k}\frac{1}{e^{\frac{E_k^{(1)}}{\theta}}-1}} \qquad (III\ 3.5)$$

Sada ćemo preurediti zakon disperzije za magnone koji je dat jednačinom

$$E_k^{(1)} = \frac{1}{2}\sigma(A_0 - A_k) + \frac{1}{2}J_0(\bar{n}_2 - \bar{n}_1) \qquad (III\ 3.6)$$

Označimo da je $f(\theta) = \frac{1}{2}J_0(\bar{n}_2 - \bar{n}_1)$ gde je

$$\bar{n}_2 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{e^{\frac{1}{\theta}\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu - \frac{1}{4}J_0\right]} + 1} \qquad (III\ 3.7)$$

$$\bar{n}_2 = \frac{1}{N}\sum_{\vec{k}}\frac{1}{e^{\frac{1}{\theta}\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu + \frac{1}{4}J_0\right]} + 1} \qquad (III\ 3.8)$$

Pri $\theta \approx \theta_c$ (θ_c Kiri tačka) $\theta \gg \frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu \pm \frac{1}{4}J_0$

Na temperaturi 1000^0K izrazi pod sumom u jednačinama (III 3.7 i III 3.8) imaju sledeći oblik

$$\frac{1}{e^{\frac{1}{\theta}\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu \mp \frac{1}{4}J_0\right]} + 1} \simeq \frac{1}{2}\left\{1 - \frac{1}{2\theta}\left[\frac{\hbar^2 k^2}{2m_e} - \mu \mp \frac{1}{4}J_0\right]\right\}$$

pa je $\bar{n}_2 - \bar{n}_1 = \frac{J_0}{8\theta}$ $\qquad (III\ 3.9)$

Zamenom jednačine (III 3.9) u (III 3.6) dobijamo zakon disperzije za magnone u sledećem obliku

$$E_{(k)}^{(1)} = \frac{1}{2}\sigma\left(A_0 - A_k\right) + \frac{1}{16}\frac{J_0^2}{\theta} \qquad (\text{III } 3.10)$$

Zamenom preuredjenog zakona disperzije za magnone (III 3.10 u III 3.5) dobijamo izraz za magnetizaciju u sledećem obliku

$$\sigma = \frac{1}{1 + \frac{2}{N}\sum_k \frac{1}{e^{\frac{\sigma A_0}{2\theta}(1-\gamma_k) + \frac{1}{16}\left(\frac{J_0}{\theta}\right)^2} - 1}} \qquad (\text{III } 3.11)$$

gde je $\gamma_k = \frac{A_k}{A_0}$

$$\left[e^{\frac{\sigma A_0}{2\theta}(1-\gamma_k) + \left(\frac{J_0}{4\theta}\right)^2} - 1\right]^{-1} = \frac{e^{-\left(\frac{J_0}{4\theta}\right)^2}}{e^{\frac{\sigma A_0}{2\theta}(1-\gamma_k)} - e^{-\left(\frac{J_0}{4\theta}\right)^2}} = \frac{f}{e^{x_k} - f}$$

gde je $f = e^{-\left(\frac{J_0}{4\theta}\right)^2}$ a $x_k = \frac{\sigma A_0}{2\theta}(1-\gamma_k)$ pa je:

$$\frac{1}{\sigma} = 1 - 2f\frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{e^{x_k} - f} \qquad (\text{III } 3.12)$$

Pošto je $\bar{n}_2 - \bar{n}_1$ linearna funkcija od $\frac{J_0}{\theta}$ a $\frac{E_k^{(1)}}{\theta}$ kvadratna funkcija po. Kada bi $\bar{n}_2 - \bar{n}_1$ imao linearni član po $\frac{J_0}{\theta}$ i kvadratni član po $\frac{J_0}{\theta}$ onda bi $\frac{E_k^{(1)}}{\theta}$ imao kvadratni član po $\frac{J_0}{\theta}$ i član trećeg stepena po $\frac{J_0}{\theta}$.

Napomena: gde se u računu pojavi član $\left(\frac{J_o}{\theta}\right)^3$ mi ćemo ga zanemariti. Kada se član $e^{\varkappa}$ u jednačini (III 3.12) razvije u red i imajući u vidu da je $1-f = \varepsilon$ dobijamo

$$\frac{1}{\sigma} = 1 + \frac{2f}{N}\sum_k \frac{1}{\varkappa_k+\varepsilon}\left[1-\frac{1}{2}\frac{\varkappa_k^2}{\varkappa_k+\varepsilon}-\frac{1}{6}\frac{\varkappa_k^3}{\varkappa_k+\varepsilon}+\frac{1}{4}\frac{\varkappa_k^4}{(\varkappa_k+\varepsilon)^2}\right] \qquad (\text{III } 3.13)$$

Ako uzmemo da je $\varkappa_k \gg \varepsilon$ i $\varepsilon^2 = 0$ i posle niz računskih operacija dobijamo kvadratnu jednačinu koja glasi

$$\sigma^2 - \frac{\varepsilon A_o - 24f\theta C_1(1+\varepsilon)}{\varepsilon A_o(6-5f)}\,\sigma - \frac{48f\theta^2}{A_o^2(6-5f)}\,C_2 = 0 \qquad (\text{III } 3.14)$$

gde je $C_1 = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{1-\gamma_k}$ a $C_2 = \frac{1}{N}\sum_k \frac{1}{(1-\gamma_k)^2}$

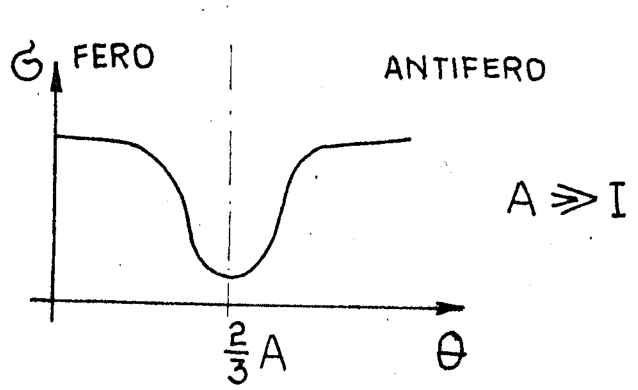
pošto je $A_o\, 6A$ a $C_1 \cong \frac{3}{2}$ rešenje jednačine (III 3.14) je

$$\sigma = \frac{8}{3I^2}\left[\theta^2 - \frac{\theta^3}{A} + \frac{1}{2}\,\frac{I^2 C_2}{A}\,\frac{1}{A-\theta}\right. \qquad (\text{III } 3.15)$$

Pošto je θ kompleksna veličina $\sigma \neq 0$ (nema nule) što znači da magnetizacija nemože da bude ravna nuli. U tom smislu s-d interakcija deluje kao i spoljašnje magnetno polje.

$$\frac{d\sigma}{d\theta} \approx 0 \text{ ako je } \frac{I}{A} \approx 0.$$

Ako je $A \gg I$, σ ima minimum za $\theta = \frac{2}{3}A$. Ovo se može pretstaviti grafički

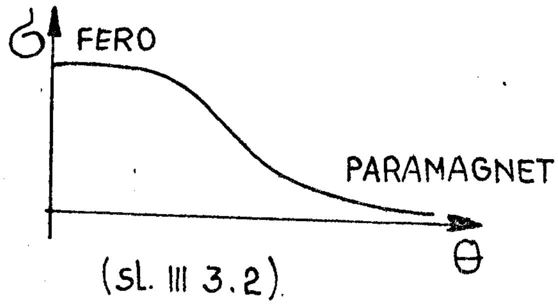


(sl. III 3.1)

Sa grafika se vidi (sl. III 3.1) da za $\Theta = \frac{2}{3}A$ feromagnet prelazi u antiferomagnet. Polazeći od formule (III 3.13) i imajući u vidu da je $\chi_K \ll \mathcal{E}$ a $\chi_K^2 \approx 0$ dobijamo da je

$$\sigma = \frac{9}{8}\left(\frac{I}{\theta}\right)^2$$

Z a slučaj $A \ll I$ grafik ima sledeći oblik



$A \ll I$

(sl. III 3.2)

Sa grafika (sl. III 3.2) se vidi da feromagnet sporo prelazi u paramagnet.

ZAKLJUČAK

Rezultati analize S-d-modela koja je ovde izvršena mogu se rezimirati na sledeći način:

a) Srednji slobodni put valentnih elektrona u blizini fermi površine i bez korekcije elektronskih energija koje dolaze usled S-d interakcije iznosi oko trideset konstanti rešetke.

b) Ako se uzmu u obzir korekcije elektronskih energija (što u svakom slučaju predstavlja realistički prilaz) onda srednji slobodni put u blizini fermi površine iznosi svega dve konstante rešetke. Iz ovoga se može izvesti zaključak da zbog jako čestih "sudara" valentnih elektrona sa lokalizovanim spinovima materijal gubi svoje provodno svojstvo tj. slobodni elektroni nailaze na veliki otpor na svom putu kroz metal. Ovo je takodje u skladu sa eksperimentalnom činjenicom da fero magnetici ne mogu biti super provodnici.

c) Valentni elektroni utiču na spinske talase tako da im povećavaju energiju. To znači da se usled S-d interakcije magnet sporije razmagnetiše.

d) U okolini tačke prelaza za običan feromagnetik, feromagnetik sa S-d interakcijama se ponaša dvojako:

1. Za slučaj slabe S-d interakcije magnetizacija ima minimum, pa se ceo sistem ponaša kao da prelazi iz feromagnetne u antiferomagnetnu fazu.
2. Za slučaj jake S-d interakcije magnetizacija teži nuli kada $T \to \infty$ bez ekstremuma pa se ovo može shvatiti kao spori prelaz iz feromagnetne u paramagnetnu fazu.

51

S A D R Ž A J

III GLAVA

ЛИТЕРАТУРА

1. С. В. Тябликов

Методы квантовой теории магнетизма „Наука" Москва 1965

2. С.В. Вонсовский, Е. А. Туров ЖЭТФ 24, 419 (1953)

3. С.В. Вонсовский Я.С. Шур

Фeромагнетизм

Гостехиздат Москва - Ленинград 1948

4. Д.Н. Зубарев

Двухвременные функции Грина в статистической физике

УФН 71, 71 (1960)

5. Н.Н. Боголюбов, С. В. Тябликов

ДАН СССР 126, 53 (1959)

6. С.В. Тябликов

Украинский мат журнал 11, 287 (1959)